

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ

ESCUELA DE POSGRADO



PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DEL PERÚ

DETERMINACIÓN DE CONSTANTES ÓPTICAS DE PELÍCULAS DELGADAS
DIELÉCTRICAS POR ESPECTROFOTOMETRÍA DE TRANSMITANCIA ÓPTICA DE
ÁNGULO VARIABLE

Tesis para optar el grado de Magíster en Física

AUTOR

José Luis León Aguirre

ASESOR

Dr. Jorge Andrés Guerra Torres

LIMA- PERÚ

2019



Dedico este trabajo a mi familia.

Agradecimientos

Este trabajo no podría haber sido realizado sin el uso de equipos de laboratorios de materiales de la sección física y el CAM. De igual modo, agradecer a la beca de maestría financiada por Concytec-Fondecyt a través del convenio 233-2915-2 que permitió la dedicación a tiempo completo en mis estudios de maestría e investigación del presente trabajo.

Quiero expresar mis agradecimientos a mi asesor de tesis Prof.Dr. Andrés Guerra por los consejos acertados e ideas innovaloras en el desarrollo de mi tesis. Así mismo, quisiera extender mis agradecimiento a Alvaro Tejada por los consejos y aportaciones en mi tesis. Del mismo modo, agradecer al Dr. Amaru. Palomino, Dr. Rolf Griesseler quienes a lo largo de mi periodo en la PUCP aportaron en mi formación científica con sus sugerencias, clases y exigencia.



Resumen

Entre los varios métodos que existen para obtener los parámetros ópticos de películas delgadas, un grupo se centra en el uso de medidas espectrales de reflectancia y transmitancia óptica y otros en el uso de medidas de transmitancia óptica únicamente. En el presente trabajo se desarrolla un método para obtener las constantes ópticas de películas delgadas empleando un estimador global insesgado sin usar modelos de dispersión. Para ello son necesarias medidas adicionales con el fin de incrementar la redundancia. En este caso se mide transmitancia óptica con ángulo de incidencia oblicua variable empleando luz polarizada en películas delgadas de óxido de indio dopado con estaño y terbio.

Para emplear la función error total necesitamos un modelo del sistema óptico el cual describe la transmitancia total con un ángulo de incidencia para una película delgada. Para esto se aplica el método de matriz de transferencia para describir el espectro de transmitancia experimental. La base de este método es la evolución del campo electromagnético a través de una pila de capas. Esta evolución describe dos tipos de interacciones por capa. La primera interacción es la luz interactuando con la interface de dos medios diferentes y esta información se describe mediante una matriz 2×2 , los elementos de esta matriz dependen de los coeficientes de Fresnel de transmisión y reflexión. La segunda interacción es la penetración de la onda electromagnética en el volumen de la capa y esta información se describe mediante una matriz de 2×2 , los elementos de la matriz dependen de la fase y la amortiguación de la amplitud de la onda electromagnética. Cada capa contiene una información que se representa por medio de una matriz 2×2 . El espectro de la transmitancia y reflectancia de una pila de capa se representa por el producto ordenado de las matrices que describen los efectos individuales de las fronteras y las de propagación dentro de cada capa.

Para obtener el espesor " d ", índice de refracción $n(\lambda_i)$ y el coeficiente de extinción $k(\lambda_i)$ se emplea el método de optimización. El método de optimización consiste en minimizar la función error y obtener las constantes ópticas bajo ciertas restricciones. Para un valor " d ", el índice de refracción complejo $n(\lambda_i) + ik(\lambda_i)$ se calcula minimizando la función error en cada longitud de onda. La función error depende de la medida experimental y del modelo teórico para cada longitud de onda. Si aumentamos en la función error la cantidad de medidas independientes en cada longitud de onda y se emplea el método de optimización mayor será la consistencia en la determinación de $n(\lambda_i) + ik(\lambda_i)$. Para obtener el espesor de la película delgada " d " mediante el método de optimización es necesario garantizar la minimización la función error total. La función error total depende del parámetro " d " y de las medidas independientes. La función error total es equivalente a la suma de la función error de todos los puntos medidos.

Para obtener el verdadero espesor de la película delgada se requiere los siguientes pasos. Primero, minimizar la función error total para un espesor " d ". Segundo, realizar el mismo procedimiento para un conjunto de espesores. Tercero, el mejor valor " d " es el mínimo valor del conjunto de resultado al minimizar la función error total aplicado a un conjunto de espesores. Finalmente, el mejor valor " d " se aplica directamente en la función error en cada longitud de onda para determinar $n(\lambda_i)$ y $k(\lambda_i)$. La obtención de estas constantes ópticas se compara con los resultados del método de la envolvente mejorada.

ÍNDICE GENERAL

INTRODUCCIÓN	6
MARCO TEÓRICO	9
2.1 CONSTANTES ÓPTICA	9
2.2 TRANSMISIÓN Y REFLEXIÓN DE LA LUZ	11
2.2.1 Ondas de luz polarizadas en p y s	11
2.2.2 Refracción de la luz.	12
2.2.3 Coeficiente de Fresnel	12
2.1 MÉTODO MATRIZ DE TRANSFERENCIA	14
2.2 MÉTODO MATRIZ DE TRANSFERENCIA- INCOHERENTE.....	16
2.2 TRASMITANCIA DE UNA PELÍCULA DELGADA SOBRE UN SUSTRATO	20
MÉTODO ÓPTICO	24
3.1 MÉTODO DE LA ENVOLVENTE.....	24
3.1.1 Transmitancia total para una película delgada sobre sustrato transparente	24
3.1.2 Envolvente Máxima y Mínima	25
3.1.3 Transmitancia libre de interferencia	26
3.2 MÉTODO DE LA ENVOLVENTE MEJORADA.....	27
3.3 MÉTODO DE OPTIMIZACIÓN GLOBAL	28
3.3.1 Implementación del método de optimización	29
DETALLE EXPERIMENTAL.....	33
4.1 PORTAMUESTRA GIRATORIO.....	33
4.2 CALIBRACIÓN DEL POLARIZADOR	34
RESULTADOS Y DISCUSIÓN	36
5.1 SIMULACIÓN NUMÉRICA	36
5.2 RESULTADOS	38
CONCLUSIONES.....	43
BIBLIOGRAFIA	45

Capítulo 1

Introducción

El conocimiento del espesor, índice de refracción y coeficiente de extinción de una película delgada es crucial para el diseño y la eficiencia en dispositivos optoelectrónicos. En este sentido, se han desarrollado numerosos métodos para obtener las constantes ópticas en base a un ajuste de curva generado con un modelo de dispersión con respecto a la medida de transmitancia para obtención de las constantes ópticas. Sin embargo, existen una variedad de modelos de dispersión que pueden explicar el índice de refracción de la película delgada. La elección de un modelo de dispersión no asegura que sea verdadero o que simplemente es un recurso forzado para obtener ajuste de curva idéntica a la medición de transmitancia. Además, se han desarrollado otros métodos para determinar las constantes ópticas de una película delgada sin usar un modelo de dispersión usando medidas de reflectancia y transmitancia [1,2,3,4,5,6]. Estos métodos conllevan a resultados como la discontinuidad de la curva del índice de refracción complejo ($\tilde{n} = n + ik$) y soluciones no físicas. Estos tipos de soluciones se debe a la sensibilidad del error experimental de las medidas espectrales y el nivel de complejidad de resolver el sistema de ecuaciones no lineales para obtener como solución el índice de refracción complejo \tilde{n} . Por esta razón se obtienen infinitas soluciones para \tilde{n} que pueden describir las medidas espectrales.

Esta tesis se enfoca en emplear el método de optimización para determinar de forma consistente las constantes ópticas de una película delgada sin depender de un modelo de dispersión y de espectro de reflectancia. Se emplea el método de optimización porque garantiza una mejor solución para cada longitud de onda en comparación a otros métodos que usan modelos de dispersión. Esta ventaja radica porque el método de optimización calcula las constantes ópticas de forma directa e independiente de cada longitud de onda minimizando la función error en comparación de otros métodos que usan modelos de dispersión. Cabe resaltar que los métodos que usa modelo de dispersión en el proceso del cálculo de las constantes ópticas se obtiene como resultado la limitación en la solución para ($\tilde{n} = n + ik$). Esta limitación se da porque la elección de un modelo de dispersión no asegura que sea verdadero y producto de una incorrecta elección conlleva a forzar un conjunto solución erróneo. La desventaja del método de optimización con respecto a otros métodos que usan modelos de dispersión es la cantidad de medidas independientes. Otra desventaja es el tiempo computacional para la ejecución y la obtención de las constantes ópticas con respecto al método de optimización.

Para implementar el método de optimización requiere de una cantidad de medidas independientes que esté relacionado con el ángulo de incidencia oblicua a la muestra y el estado polarizado de la luz. Para obtener estas medidas independientes se requiere la construcción de un portamuestra giratorio para el ángulo de incidencia oblicua. Se instala

polarizadores para obtener medidas de transmitancia dependiente del estado polarizado de la luz. Para obtener estas medidas de transmitancia se considera dos tipos direcciones con respecto al estado de polarización de la luz. Primero, el campo eléctrico oscila en un plano y es paralelo respecto a la dirección de propagación, esta dirección se define como luz polarizada p . Segundo, el campo eléctrico oscila en un plano y es perpendicular a la dirección de propagación, esta dirección se define como luz polarizada s .

En este presente trabajo se caracteriza la película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio producidas en el laboratorio de ciencias de los materiales de la Pontificia Católica del Perú con medidas de transmitancia usando el espectrofotómetro (PerkinElmer/ Lambda 950).

En este trabajo se presenta los siguientes objetivos:

1. Desarrollar la teoría que nos ayuda a comprender la interacción electromagnética con la película delgada.
2. Construir un portamuestra giratorio y del mismo realizar medidas de espectro de transmitancia que dependa del ángulo de incidencia.
3. Simular los espectros de transmitancia para ángulos de incidencia y luz polarizada s y p
4. Explicar detenidamente el método de optimización y comparar los resultados del método de optimización con los resultados del método de la envolvente mejorada.

El trabajo de investigación está estructurado de la siguiente forma.

En el capítulo dos se aborda la descripción teórica de los fenómenos ópticos causado por la interacción de la onda electromagnética con la película delgada y la explicación del método de matriz de transferencia [7]. Este método de matriz de transferencia ayuda a modelar el espectro de transmitancia que dependa del ángulo de incidencia y la luz polarizada s y p cuando interacciona con la película delgada.

En el capítulo tres se explica el método de la envolvente mejorada y el método de optimización para obtener las constantes ópticas de una película $n(\lambda_i)$ y $k(\lambda_i)$ para cada longitud de onda individual usando una cierta cantidad de medidas independientes.

En el capítulo cuatro se explica el uso de la portamuestra giratorio y la instalación de polarizadores para obtener estas medidas independientes. La portamuestra giratorio ayudará a obtener medidas de transmitancia que dependa de un parámetro adicional es decir del ángulo de incidencia de luz hacia la película delgada. La instalación de los polarizadores es para garantizar que la luz este polarizada en s y p e interaccione con la película delgada. Esta construcción e instalación garantiza obtener medidas independientes y que dependan exclusivamente del ángulo de incidencia y de la polarización de la luz, ver Figura 1.1.

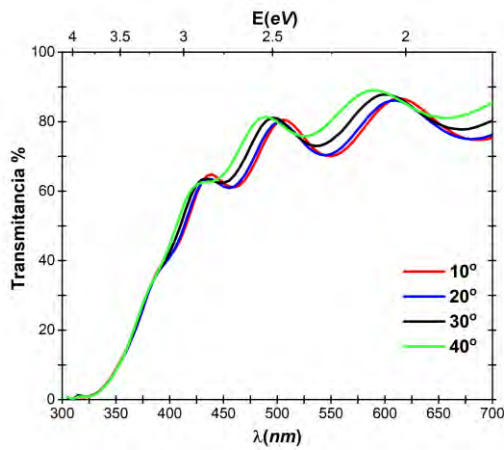


Figura a

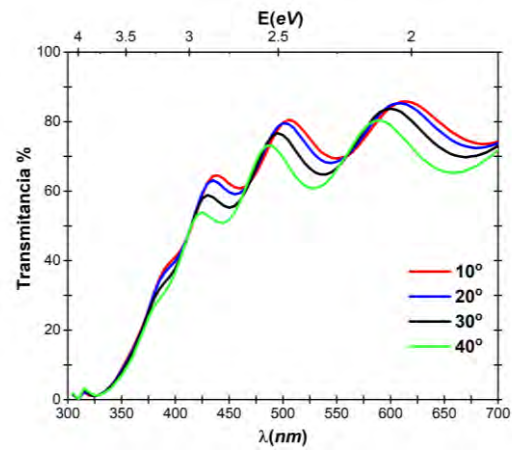


Figura b

Figura 1.1: Datos experimentales del espectro de transmitancia con luz polarizada p , ver Figura a y luz polarizada s , ver Figura b. Estas medidas de transmitancia se considera ángulo de incidencia de 10,20,30,40 grados.

En el capítulo cinco consta de dos partes. La primera parte consta de la simulación del espectro de transmitancia para una película delgada sobre sustrato transparente para ángulo de incidencia oblicua y estado de polarización s y p . La segunda parte consta de los resultados y comparación del método de optimización y el método de envolvente modificado. Finalmente se presenta las conclusiones del trabajo.

Capítulo 2

Marco Teórico

En este capítulo se describen los fenómenos de transmisión y reflexión en base a los coeficientes de Fresnel para luz polarizada s y p . Además, se obtienen las ecuaciones de los espectros de transmitancia y reflectancia de una película delgada sobre un sustrato transparente por medio del método de matriz de transferencia. Para describir las ecuaciones de transmitancia y reflectancia por medio de la matriz de transferencia se considera inicialmente la interacción de luz polarizada s y p bajo un cierto ángulo de incidencia.

2.1 Constantes Óptica

Para describir el campo eléctrico y magnético de la luz se emplea las ecuaciones de Maxwell. La ecuación (2.1) describe el campo eléctrico con respecto al tiempo cuando una onda electromagnética interactúa en un medio homogéneo e isotrópico.

$$\nabla^2 \vec{E} + \mu\sigma \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.1)$$

donde μ : Permeabilidad magnética, ϵ : Permetividad y σ : Conductividad eléctrica.

Se busca una solución de la forma:

$$E(r, t) = E_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{K} \cdot \mathbf{r} + \delta)} \quad (2.2)$$

donde \mathbf{K} : Vector de onda, ω : Frecuencia angular, δ : Fase de la onda, t : Tiempo
Si reemplazamos la ecuación (2.2) en la ecuación (2.1), existirá solución para la ecuación (2.1), siempre y cuando cumpla la siguiente relación:

$$K = \frac{\omega}{c} * \sqrt{\frac{\mu\epsilon}{\mu_0\epsilon_0} - i \frac{\mu\sigma}{\omega\mu_0\epsilon_0}} = \frac{\omega}{c} N \quad (2.3)$$

donde N es el índice de refracción complejo.

Como se ve en la ecuación (2.3) guarda relación con el índice de refracción complejo y se define en la siguiente expresión, ver ecuación (2.4).

$$N = \sqrt{\frac{\mu\epsilon}{\mu_0\epsilon_0} - i \frac{\mu\sigma}{\omega\mu_0\epsilon_0}} = n + ik \quad (2.4)$$

donde k es el coeficiente de extinción.

Como se ve en la ecuación (2.4), la parte real del índice de refracción complejo N es habitualmente el índice de refracción y la parte imaginaria es el coeficiente de extinción. El índice de refracción define la velocidad de fase de la onda electromagnética en el medio, ver Figura 2.1. El coeficiente de extinción es la descripción de los efectos de amortiguación ver Figura 2.2.

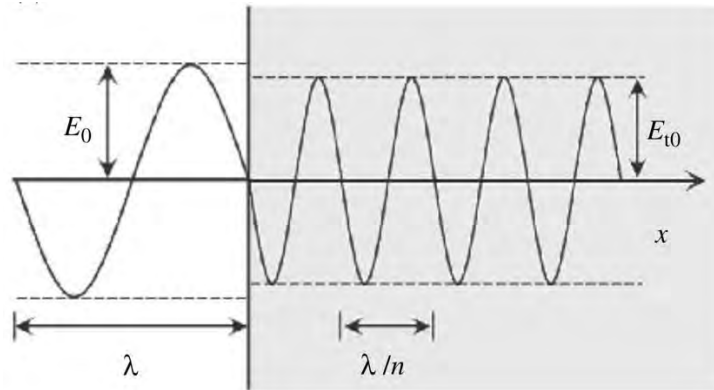


Figura 2.1: La onda electromagnética viaja en un medio transparente. La disminución de la amplitud en medios diferentes $E_0 > E_{t0}$ se debe porque luz se refleja en el interfaz. Además, la longitud de onda disminuye $\frac{\lambda}{n}$ se debe a la reducción de la velocidad de la luz en este medio. Figura extraída de [8].

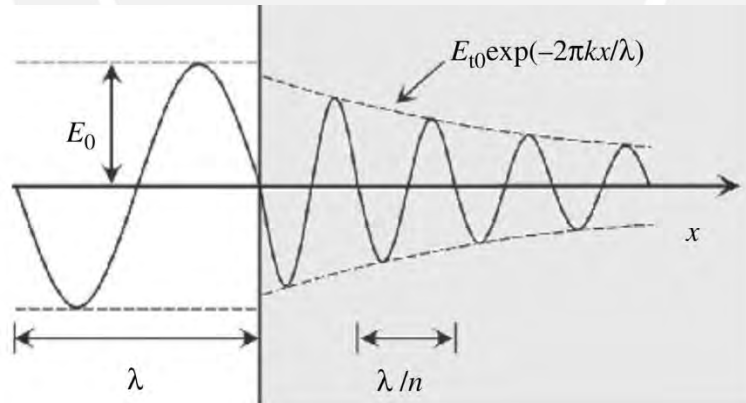


Figura 2.2: La longitud de la onda electromagnética no tiene efectos cuando la luz viaja en un medio absorbente. La amplitud de la onda electromagnética disminuye a lo largo del eje x con el factor $e^{-\frac{\omega}{c} k x}$. Figura extraída de [8].

Se elige por simplicidad un sistema de referencia tal que K es paralelo al eje x , entonces la ecuación (2.2) describe una onda plana que se desplaza a lo largo del eje x , ver ecuación (2.5).

$$E = E_0 e^{-i(\omega t - \frac{\omega}{c} N x + \delta)} \quad (2.5)$$

donde k es el coeficiente de extinción.

Entonces la onda plana depende de la amplitud y de la fase, como se aprecia en la siguiente ecuación:

$$E = E_0 e^{-\frac{\omega}{c} k x} e^{-i(\omega t - \frac{\omega}{c} n x + \delta)} \quad (2.6)$$

donde la amplitud depende de x y del coeficiente de extinción k :

$$E_0(x) = E_0 e^{-\frac{\omega}{c} k x}$$

De la ecuación (2.6), el factor $E_0 e^{-\frac{\omega}{c} k x}$ actúa como atenuante de la amplitud de la onda ver ecuación (2.8), a medida que la onda viaja a través de un medio absorbente este disminuye en proporción a su desplazamiento " x ".

La intensidad de la onda de luz es proporcional al cuadrado del módulo de la amplitud ver ecuación (2.8). Se puede observar que la intensidad disminuye exponencialmente en base a un factor y se define como el coeficiente de absorción, ver ecuación (2.7). La ecuación (2.8) es también conocida como la ley de absorción de Lambert.

$$\alpha = 4\pi \frac{k}{\lambda} \quad (2.7)$$

$$I = |E \cdot E^*| = E_0^2 e^{-2\frac{\omega}{c} k x} = E_0^2 e^{-\alpha x} \quad (2.8)$$

2.2 Transmisión y reflexión de la luz

En esta parte se revisa el concepto de luz polarizada s y p , las ecuaciones de Fresnel y la ley generalizada de Snell. Se revisa la aplicación de estos conceptos para la comprensión del fenómeno de transmisión y reflexión de la luz cuando una onda electromagnética interacciona con la interface o superficie que separa dos medios diferentes.

2.2.1 Ondas de luz polarizadas en p y s .

En la polarización p , el campo eléctrico de la onda electromagnética oscila linealmente en el plano de incidencia, ver Figura 2.3. El campo magnético oscila linealmente en dirección perpendicular al plano de incidencia. En la polarización s surge lo contrario, el campo eléctrico de la onda electromagnética oscila linealmente en dirección perpendicular al plano de incidencia y el campo magnético oscila linealmente en dirección paralelo al plano de incidencia, ver Figura 2.4.

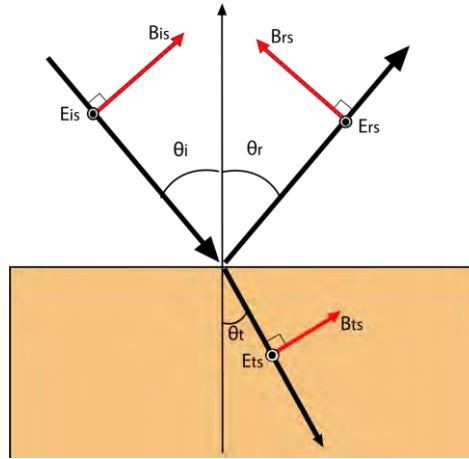


Figura 2.3: Luz polarizada *s*, El campo eléctrico se representa por *E* y el campo magnético por *B*, el ángulo de incidencia, reflejado y transmitido se representa por $\theta_i, \theta_r, \theta_t$

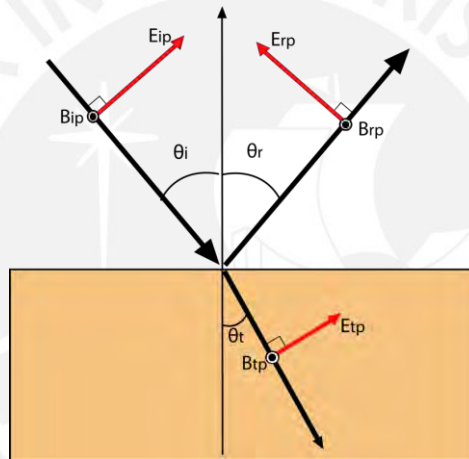


Figura 2.4: Luz polarizada *p*, El campo eléctrico se representa por *E* y el campo magnético por *B*, el ángulo de incidencia, reflejado y transmitido se representa por $\theta_i, \theta_r, \theta_t$.

2.2.2 Refracción de la luz.

Cuando la luz atraviesa una superficie plana bajo un cierto ángulo de incidencia, generalmente cambia la velocidad y de dirección de propagación de la luz al pasar a otro medio diferente. Este cambio de velocidad y dirección de la luz es el resultado de la refracción de la luz y se puede predecir usando la ley de Snell Generalizado [9], ver ecuación (2.9).

$$N_1 \sin(\theta_1) = N_2 \sin(\theta_2) \quad (2.9)$$

Se considera para medios absorbentes es decir para $k \neq 0$.

2.2.3 Coeficiente de Fresnel

Los coeficientes de Fresnel brindan información con respecto la relación del campo eléctrico transmitido y reflejado cuando la onda electromagnética atraviesa la interface de dos medios diferentes, ver ecuación (2.10, 2.11).

Coeficiente de transmisión:

$$r = \frac{E_r}{E_i} \quad (2.10)$$

Coeficiente de reflexión:

$$r = \frac{E_r}{E_i} \quad (2.11)$$

donde:

E_r : Campo eléctrico reflejado.

E_t : Campo eléctrico transmitido.

E_i : Campo eléctrico incidente.

Los coeficientes de Fresnel se pueden calcular en función de los campos eléctricos reflejados, transmitidos o incidentes, ver ecuación (2.10, 2.11). Estos coeficientes también se escriben en función de las constantes ópticas y condiciones iniciales. Estas constantes ópticas corresponden al índice de refracción compleja de dos medios en donde interactúa la luz y las condiciones iniciales corresponden al estado de polarización de la luz y al ángulo de incidencia de la luz en la interface de dos medios diferentes, ver Figura 2.5. Para determinar los coeficientes de Fresnel en función de las constantes ópticas y condiciones iniciales partimos de las condiciones de contorno. Estas condiciones de contorno describen la interacción de las componentes electromagnéticas con la interface de dos medios diferentes. Es decir, la componente tangencial del campo eléctrico E no cambia al atravesar la superficie plana de los medios diferentes. La componente normal del campo magnético B no cambia al atravesar la frontera entre los medios diferentes. En base a estas condiciones se obtiene la relación de campo eléctrico transmitido y reflejado en base a la componente incidente ver ecuación (2.12, 2.13). La obtención de estos coeficientes brinda la información del cambio de fase en el interfaz y de amplitud. Estas relaciones también son conocidas como los coeficientes de Fresnel. Los coeficientes de Fresnel son diferentes si usamos luz polarizada s y p . Este cambio radica en el campo eléctrico debido a las diferentes orientaciones con respecto al plano incidente, ver Figura 2.3 y 2.4. Los coeficientes de Fresnel para luz polarizada s y p se escriben de la siguiente forma [8, 9]:

Luz polarizada p :

$$\begin{aligned} r_{ij}^p &= \frac{N_j \cos(\theta_i) - N_i \cos(\theta_j)}{N_j \cos(\theta_i) + N_i \cos(\theta_j)} \\ t_{ij}^p &= \frac{2N_i \cos(\theta_i)}{N_j \cos(\theta_i) + N_i \cos(\theta_j)} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Luz polarizada s :

$$\begin{aligned}
r_{ij}^s &= \frac{N_i \cos(\theta_i) - N_j \cos(\theta_j)}{N_i \cos(\theta_i) + N_j \cos(\theta_j)} \\
t_{ij}^s &= \frac{2N_i \cos(\theta_i)}{N_i \cos(\theta_i) + N_j \cos(\theta_j)}
\end{aligned}
\tag{2.13}$$

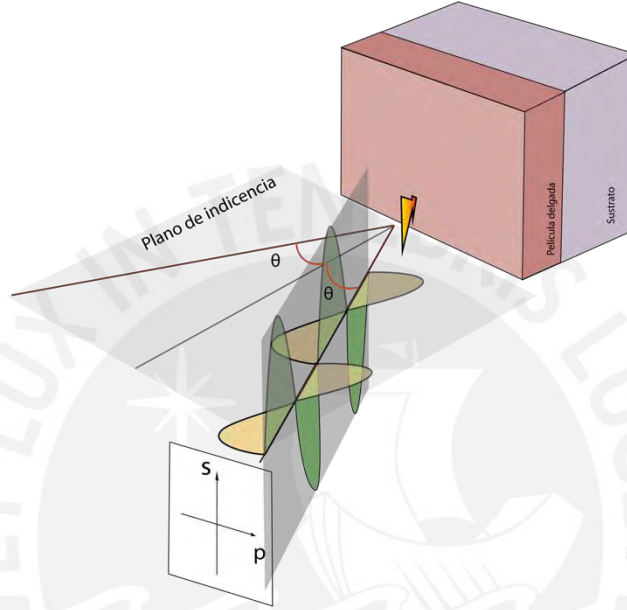


Figura 2.5: La posición de la película en el experimento está de acuerdo al gráfico. La luz polarizada s cuyo campo eléctrico oscila en el plano perpendicular al plano de incidencia y luz polarizada p cuyo campo eléctrico de la onda oscila paralelamente al plano de incidencia.

2.1 Método matriz de transferencia

El método de matriz de transferencia asume una pila de capas delgadas compuesta por capas ópticamente homogénea e isotrópica, con caras planas y paralelas. El método consiste en analizar la propagación de la onda electromagnética en varias capas y representar cada capa como una matriz. El producto de estas matrices representa el sistema de multicapas. Los elementos de cada matriz se pueden escribir en términos del coeficiente de Fresnel, la ganancia de fase y la amortiguación de la onda de luz. La interacción de la luz con el interfaz se puede representar como una matriz. Los elementos de esta matriz se pueden escribir en términos del coeficiente de Fresnel. La matriz ayuda a derivar el campo eléctrico final considerando las condiciones iniciales del campo eléctrico entrante [7], ver ecuación (2.14).

$$\begin{pmatrix} E_{m-1}^+ \\ E_{m-1}^- \end{pmatrix} = \frac{1}{t_{m-1,m}} \begin{pmatrix} 1 & r_{m,m-1} \\ r_{m-1,m} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{m-1}'^+ \\ E_{m-1}'^- \end{pmatrix} = D_{m-1}^{-1} D_m \begin{pmatrix} E_{m-1}'^+ \\ E_{m-1}'^- \end{pmatrix}
\tag{2.14}$$

Después de la interacción de la luz con el interfaz, la amplitud del campo eléctrico resultante disminuye producto de la propagación hasta llegar al otro interfaz. Esta información se puede representar en una matriz. Los elementos de esta matriz contienen información de la ganancia de fase y la amortiguación de la amplitud de la luz, ver ecuación (2.15).

$$\begin{pmatrix} E_{m-1}^{'+} \\ E_{m-1}^{'-} \end{pmatrix} = \frac{1}{t_{m-1,m}} \begin{pmatrix} \exp(-i\delta_{m-1}) & 1 \\ 1 & \exp(+i\delta_{m-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{m-1}^{+} \\ E_{m-1}^{-} \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

$$= P_{m-1} \begin{pmatrix} E_{m-1}^{+} \\ E_{m-1}^{-} \end{pmatrix}$$

donde $\delta_{m-1} = 2\pi \cos(\beta) \hat{N}_{m-1} d$. Cuando la luz viaja a través de la capa obtiene una ganancia de fase δ , ver figura 2.10. La diferencia de fase entre dos primeros haces refractados es equivalente a 2δ . El factor $\exp(i\delta)$ describe el amortiguamiento de la onda electromagnética en la película delgada.

Una pila de capas se puede representar como una matriz del sistema, que es el producto de las matrices por cada capa individual, ver ecuación (2.16). Esta pila de capa se presenta gráficamente en la Figura 2.6

$$\begin{pmatrix} E_0^{+} \\ E_0^{-} \end{pmatrix} = D_0 \left(\prod_{m=1}^N D_m P_m D_m^{-1} \right) D_{N+1} \begin{pmatrix} E_{N+1}^{+} \\ E_{N+1}^{-} \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

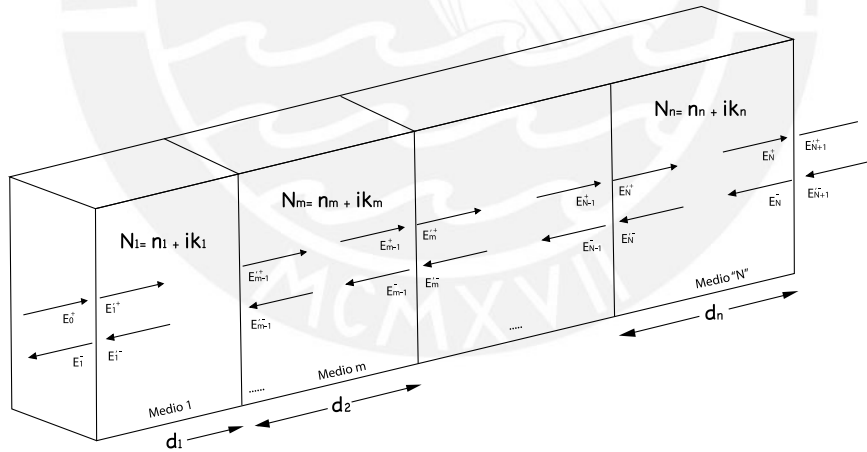


Figura 2.6: El campo eléctrico evoluciona cuando pasa por la interface y el medio absorbente. Se considera E_{m-1}^{+} campo eléctrico transmitido, E_{m-1}^{+} cuando pasa por el medio "m - 1" y E_{m-1}^{-} campo eléctrico reflejado por la interface "m".

Existen casos especiales donde la superficie es rugosa y cuando el espesor de la capa es grueso. Al interactuar la onda electromagnética en una superficie rugosa, produce una disminución en los coeficientes de Fresnel. Los coeficientes de Fresnel modificados se expresan de la siguiente forma [7]:

$$\begin{aligned}
r'_{m,m-1} &= t_{m,m-1} \exp\left(-2 \left(\frac{2\pi\sigma}{\lambda}\right)^2 n_m^2\right) \\
r'_{m-1,m} &= t_{m-1,m} \exp\left(-2 \left(\frac{2\pi\sigma}{\lambda}\right)^2 n_{m-1}^2\right) \\
t'_{m,m-1} &= t_{m,m-1} \exp\left(-\left(\frac{2\pi\sigma}{\lambda}\right)^2 (n_m - n_{m-1})^2\right) \\
t'_{m-1,m} &= t_{m-1,m} \exp\left(-\left(\frac{2\pi\sigma}{\lambda}\right)^2 (n_{m-1} - n_m)^2\right)
\end{aligned} \tag{2.17}$$

donde σ es la rugosidad de la superficie.

El efecto de la rugosidad en la superficie la película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio no se considera para el análisis del espectro de transmitancia. La razón del porqué no se considera el efecto de rugosidad en la transmitancia es porque el valor de la rugosidad es bajo en la superficie de la película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio. El efecto de un bajo valor de la rugosidad en la película delgada causa que la dispersión de la luz resultante sea equivalente a la transmitancia total. Para esta muestra se asume la transmitancia total equivalente a la transmitancia especular de una muestra plana [3]. Por esta razón consideramos para esta muestra:

$$\sigma = 0$$

De la ecuación (2.26), modificamos los coeficientes de Fresnel considerando σ nula:

$$\begin{aligned}
r'_{m,m-1} &= t_{m,m-1} \\
r'_{m-1,m} &= t_{m-1,m} \\
t'_{m,m-1} &= t_{m,m-1} \\
t'_{m-1,m} &= t_{m-1,m}
\end{aligned} \tag{2.18}$$

El método de matriz de transferencia o equivalente a matriz de transferencia-coherente describe el espectro de transmitancia de una pila de capa cuando incide luz monocromática. Este método también es aplicable cuando la luz no es perfectamente monocromática, pero debe cumplir un requisito es decir que la longitud de coherencia debe ser mayor al valor del espesor de cada capa. La longitud de coherencia es un valor donde la fase de la luz se mantiene estable y constante. Este requisito indispensable para mantener la luz coherente bajo múltiples reflexiones en cada capa [9].

En caso donde una capa exceda el valor de la longitud de coherencia entonces existe se observa oscilaciones rápidas en el espectro de transmitancia [9,10]. Estas oscilaciones rápidas no pueden ser resueltos por instrumentos porque el valor de ancho de banda espectral del espectrofotómetro es limitado [10]. En este caso se aplica el método matriz de transferencia-incoherente para solucionar el problema de resolución del espectrofotómetro y de las oscilaciones rápidas en el espectro de transmitancia.

2.2 Método matriz de transferencia- incoherente

En caso de una bicapa conformada por una capa delgada sobre una capa gruesa se emplea el método de matriz de transferencia aplicando tratamiento incoherente para

calcular las ecuaciones de transmitancia y reflectancia total. Este tratamiento incoherente logra en obtener una equivalencia del método de matriz de transferencia, pero sin considerar el efecto de oscilaciones rápidas, ver Figura 2.7 [7].

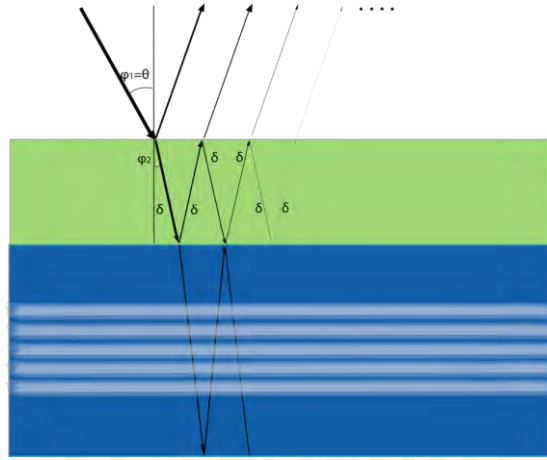


Figura 2.7 La amplitud de la onda de luz disminuye cuando la longitud del camino óptico aumenta. En el sustrato no se considera la información de la fase sino la suma de las intensidades de las múltiples reflexiones que ocurre en el sustrato.

Para determinar las ecuaciones del espectro de transmitancia y reflectancia se identifica la capa incoherente " m ". Se modifica los elementos de la matriz de propagación de la capa gruesa. Aplicando el módulo al cuadrado en los elementos del cambio de fase y la atenuación de la matriz (2.19), la nueva modificación matricial se escribe de la siguiente forma:

$$P_m^{int} = \begin{pmatrix} |\exp(-i\delta_{m-1})|^2 & 1 \\ 1 & |\exp(+i\delta_{m-1})|^2 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

En esta matriz modificada considera la suma de las intensidades del campo eléctrico incidente (intensidad de atenuación pura) en la capa gruesa sin considerar la información de la fase.

Luego se identifica las matrices de transferencia de dos multicapas coherente. Estas dos multicapas surgen por la separación de la capa gruesa. En la primera multicapa calculamos la matriz de transferencia desde la interacción de la luz incidente entrante " 0 " hasta el interfaz de separación de la capa gruesa " m " [2, 9]. Los elementos de esta matriz son modificados aplicando el módulo al cuadrado respecto al coeficiente de transmisión y reflexión, ver ecuación (2.20).

$$T_{0/m}^{int} = \frac{1}{|t_{0,m}|^2} \begin{pmatrix} 1 & |r_{m,m-1}|^2 \\ |r_{m-1,m}|^2 & |t_{0,m} t_{m,0}|^2 - |r_{0,m} r_{m,0}|^2 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Se calcula la segunda matriz donde la luz se propaga por la capa " m " hasta la capa " $N + 1$ ". La segunda matriz se obtiene multiplicando las matrices de cada capa individual. Se modifica los elementos de la segunda matriz al igual que la matriz (2.21).

$$T_{m/N+1}^{int} = \frac{1}{|t_{m,N}|^2} \begin{pmatrix} 1 & |r_{m,N+1}|^2 \\ |r_{m,N+1}|^2 & |t_{m,N+1} t_{N+1,m}|^2 - |r_{m,N+1} r_{N+1,m}|^2 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

La matriz del sistema se obtiene multiplicando las matrices (2.19), (2.20) y (2.21), ver ecuación (2.22).

$$\begin{aligned} T_{0,N+1}^{incoherente} &= \begin{pmatrix} T_{1,1}^{incoherente} & T_{1,2}^{incoherente} \\ T_{2,1}^{incoherente} & T_{2,2}^{incoherente} \end{pmatrix} = T_{0/m}^{int} P_m^{int} T_{m/M+1}^{int} \\ &= \frac{1}{|t_{0,m}|^2} \begin{pmatrix} 1 & |r_{m,m-1}|^2 \\ |r_{m-1,m}|^2 & |t_{0,m} t_{m,0}|^2 - |r_{0,m} r_{m,0}|^2 \end{pmatrix} \\ &\quad \begin{pmatrix} |\exp(-i\delta_{m-1})|^2 & 1 \\ 1 & |\exp(+i\delta_{m-1})|^2 \end{pmatrix} \\ &\quad \frac{1}{|t_{m,N}|^2} \begin{pmatrix} 1 & |r_{m,N+1}|^2 \\ |r_{m,N+1}|^2 & |t_{m,N+1} t_{N+1,m}|^2 - |r_{m,N+1} r_{N+1,m}|^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.22)$$

La transmitancia y reflectancia total se obtienen de los elementos de matriz del sistema (2.22). Ver ecuación (2.23)

$$\begin{aligned} R_{incoherente} &= \frac{T_{2,1}^{incoherente}}{T_{1,1}^{incoherente}} \\ T_{incoherente} &= \frac{1}{T_{1,1}^{incoherente}} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Para calcular los espectros de transmitancia y reflectancia del sistema considerando el efecto de la luz polarizada en las multicapas se debe considerar una modificación en la matriz $D_{m-1}^{-1} D_m$. Dependiendo del estado de polarización de luz se asignará dos tipos de matrices, ver ecuación (2.24).

$$D_i = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ n_i \cos \theta_i & -n_i \cos \theta_i \end{pmatrix} & \text{Tipo } S \\ \begin{pmatrix} \cos \theta_i & \cos \theta_i \\ n_i & -n_i \end{pmatrix} & \text{Tipo } P \end{cases} \quad (2.24)$$

Reemplazando la matriz (2.31) en la ecuación (2.13), seguir los pasos que se indican al inicio del método para determinar transmitancia y reflectancia con tratamiento incoherente con luz polarizada s ($R_{incoherente}^S$, $T_{incoherente}^S$) y luz polarizada p

Usando el método matriz de transferencia-coherente e incoherente vamos a simular el espectro de transmitancia para una capa delgada sobre una capa gruesa, ver Figura 2.8

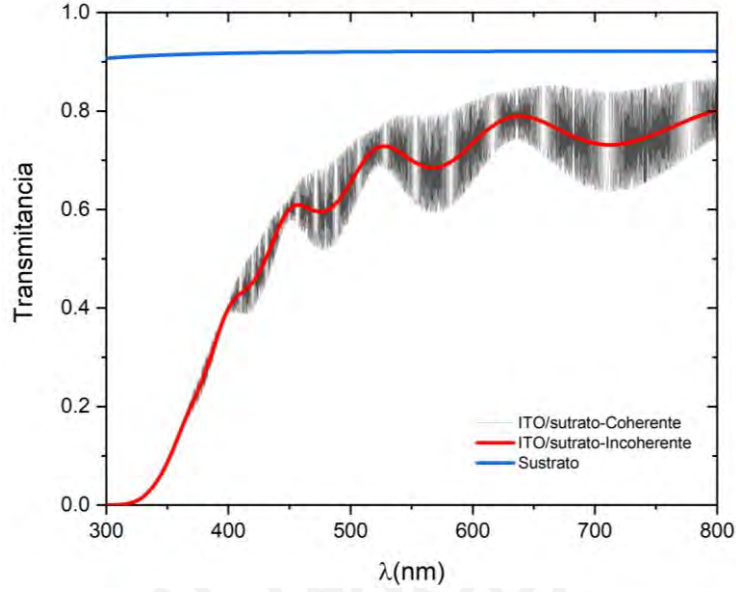


Figura 2.8: Línea azul corresponde la simulación del espectro de transmitancia del sustrato. La línea roja corresponde la simulación del espectro de transmitancia de la película delgada de óxido de indio (ITO) dopado con estaño y terbio bajo un sustrato transparente grueso (CaF₂) aplicando método matriz de transferencia-incoherente. Línea negra es el espectro simulado de ITO/sustrato aplicando el método matriz de transferencia-coherente.

En la figura 2.6, se observa oscilaciones rápidas en el espectro de transmitancia cuando se emplea el método de transferencia-coherente. Las oscilaciones rápidas indican que hay un mecanismo de interferencia por parte de la capa gruesa cuyo espesor es 1 mm. Estas oscilaciones rápidas no pueden ser resueltas por instrumento porque el ancho de banda espectral del monocromador $\Delta\lambda_{\text{Espec.}} \geq 0.5 \text{ nm}$ es mayor que el ancho de banda espectral de la película delgada sobre sustrato transparente [10].

Una forma de distinguir y aplicar el método matriz de transferencia-incoherente o el método matriz de transferencia-coherente es diferenciar si la capa es gruesa o delgada. Sin embargo, cómo identificar si la capa es gruesa o delgada. En este caso se usa una ecuación (2.24) para identificar si la capa es gruesa o delgada.

Para deducir esta ecuación, se define el ancho de banda espectral $\Delta\lambda$ como la diferencia de dos longitudes de onda y estos dos puntos se encuentran en la mitad de la intensidad máxima (FWHM) [10]. Para determinar el ancho de banda espectral se considera un haz de luz que se propaga en una capa gruesa desde la primera interface a una segunda interface y luego por reflexión se propaga en la primera interface, entonces el tiempo de viaje de la luz será, ver ecuación (2.25) [9]:

$$t = \frac{2nd_{\text{sustrato}}}{c} \quad (2.25)$$

El tiempo de coherencia de la luz $t_{\text{coh.}}$, deja de ser coherente cuando, ver ecuación (2.26):

$$t = \frac{2nd_{\text{sustrato}}}{c} > t_{\text{coherencia}} \quad (2.26)$$

El ancho espectral se relaciona con el tiempo de coherencia t_{coh} , ver ecuación (2.27).

$$\Delta\omega = \frac{2}{t_{coherencia}} \quad (2.27)$$

El número de propagación K es equivalente a la ecuación (2.28) considerando un medio no absorbente [5]:

$$K = \frac{\omega n}{c} = \frac{2\pi n}{\lambda} \quad (2.28)$$

donde ω : frecuencia angular, n : índice de refracción y c : velocidad de la luz.

De la ecuación (2.27) despejamos ω y calculamos $\Delta\omega$ con respecto a $\Delta\lambda$:

$$\Delta\omega = \frac{2\pi c}{\lambda^2} \Delta\lambda \quad (2.29)$$

De la ecuación (2.20) y (2.19), se obtiene:

$$d_{sustrato} > \frac{c}{n\Delta\omega} \quad (2.30)$$

Reemplazamos (2.26) en (2.27), se obtiene la siguiente relación [5]:

$$d_{sustrato} > \frac{\lambda^2}{2\pi n \Delta\lambda} \text{ o } \Delta\lambda > \frac{\lambda^2}{2\pi n d_{sustrato}} \quad (2.31)$$

Considerando las constantes ópticas del sustrato y reemplazamos en la ecuación (2.31), se obtiene el siguiente valor del ancho de banda espectral $\Delta\lambda_s$ de película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio, considerando el valor de la longitud de onda $\lambda = 1340 \text{ nm}$, espesor del sustrato $d_{sustrato} = 0.5 \text{ mm}$ y el índice de refracción del sustrato $n = 1.5$:

$$\Delta\lambda_s = 0.19 \text{ nm} \quad (2.32)$$

Se puede concluir que el valor de $\Delta\lambda_s$ es que el valor $\Delta\lambda_{Espec} \geq 0.5 \text{ nm}$ [10]. La ecuación (2.31) permitirá formular un criterio para identificar si una capa gruesa genera en su espectro de transmitancia oscilaciones rápidas tanto que no podrá ser resuelta por instrumento. En estos casos será inválido usar el método de matriz de transferencia-coherente. En mejor de los casos se emplea para capa gruesa el método matriz de transferencia/incoherente.

2.2 Transmítancia de una película delgada sobre un sustrato

El objetivo principal es determinar las constantes ópticas de una película delgada sobre un sustrato transparente de forma consistente. La película delgada sobre un sustrato

transparente se representa en la siguiente Figura 2.9. Para determinar las constantes ópticas de la película delgada se usa un modelo que describa el conjunto de medidas independientes. En esta tesis se usa el método matriz de transferencia empleando tratamiento incoherente para describir el conjunto de medidas independientes. Para aplicar el método matriz de transferencia empleando tratamiento incoherente debemos comparar la resolución calculada a partir de las constantes ópticas de la bicapa conformado por una capa delgada en orden de nanómetros sobre una capa en orden de milímetros (sustrato) y el ancho de banda espectral del espectrofotómetro. Si el ancho de banda espectral de la bicapa $\Delta\lambda_s$ es mucho menor que el ancho de banda espectral del espectrofotómetro $\Delta\lambda \geq 0.5 \text{ nm}$, entonces se aplica el método matriz de transferencia empleando tratamiento incoherente para el análisis del espectro de transmitancia. Si al contrario $\Delta\lambda_s$ es mayor que el ancho de banda del espectrofotómetro $\Delta\lambda_{Espec}$ se aplica el método matriz de transferencia para obtener las ecuaciones del espectro de transmitancia y reflectancia.

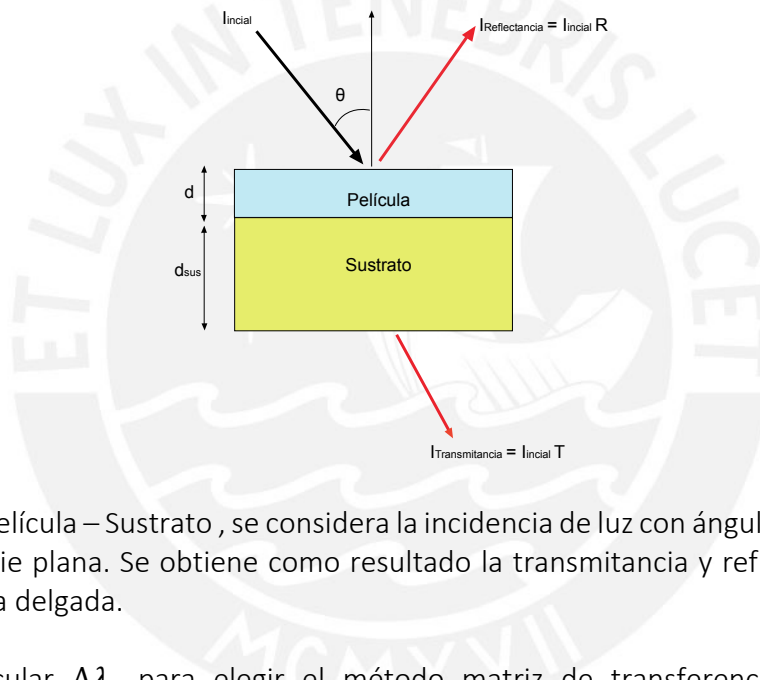


Figura 2.9: Película – Sustrato , se considera la incidencia de luz con ángulo oblicuo para una superficie plana. Se obtiene como resultado la transmitancia y reflectancia total de la película delgada.

Se debe calcular $\Delta\lambda_s$ para elegir el método matriz de transferencia-coherente o incoherente y se aplicará para la película delgada sobre sustrato transparente. Para calcular $\Delta\lambda_s$ se reemplaza el espesor del sustrato (CaF2) $d = 1 \text{ mm}$, el índice de refracción del sustrato 1.5 y longitud de onda $\lambda = 1340 \text{ nm}$, en la ecuación (2.31). El valor calculado es equivalente a la ecuación (2.32). Se determino que $\Delta\lambda_s$ es menor que el ancho de banda espectral del espectrofotómetro entonces se aplica el método matriz de transferencia empleando tratamiento incoherente.

Los parámetros que influyen al espectro de transmitancia del sistema película sobre un sustrato esta descrito en el siguiente cuadro:

Parámetros ópticos	Película	Sustrato
Índice de refracción	n	s
Coeficiente de Extinción	k	k_s

Indice de refracción Complejo	$N = n - ik$	$N_s = s - ik_s$
Espesor	d	d_s
Factor fase	$\delta = (2\pi Nd)/\lambda$	$\delta_s = (2\pi N_s d_s)/\lambda$
Rugosidad	σ	σ_s
Longitud de onda	λ	λ
Ángulo de incidencia	θ	θ_s

Se calcula la matriz del sistema película-sustrato y se obtiene la ecuación del espectro de transmitancia(T), ver la ecuación (2.33) [9,11].

$$T = \frac{|t_{123}|^2 |t_{31}|^2 e^{(-2Im(\delta_{sus}))}}{1 - |r_{123}|^2 |r_{31}|^2 e^{(-4Im(\delta_{sus}))}} \quad (2.33)$$

$$t_{123} = \frac{t_{12} t_{23} e^{i\delta}}{1 + r_{12} r_{23} e^{2i\delta}} \quad (2.34)$$

$$r_{123} = \frac{r_{12} r e^{2i\delta}}{1 + r_{12} r_{23} e^{2i\delta}}$$

$$\begin{aligned} \delta_{sus} &= \frac{2\pi d_{sus}}{\lambda} \sqrt{(N_{sus})^2 - \sin^2(\theta)} \\ \delta &= \frac{2\pi d}{\lambda} \sqrt{(N)^2 - \sin^2(\theta)} \end{aligned} \quad (2.35)$$

donde δ y δ_{sus} son las fases de la película y sustrato, ver ecuación (2.35). El termino t_{12} , t_{23} , t_{31} y r_{12} , r_{23} , r_{31} son los coeficientes de Fresnel que nos permiten medir la relación del campo eléctrico transmitido y reflejado común entre los medios enumerados en los subíndices. El termino r_{123} , ver ecuación (2.34), corresponde a la suma de los campos eléctricos reflejados en la aire. La suma de los campos eléctricos reflejados son producto de la multiple reflexión de la luz en la película delgada sin considerar la reflexión por parte del interface sustrato y aire. El termino t_{123} , ver ecuación (2.34), corresponde a la intensidad de campo eléctrico producto de las multiples reflexiones en la película delgada cuyo resultado es la intensidad de las ondas transmitidas en dirección al sustrato (parte de la luz transmitida se propaga en el medio sustrato) sin considerar el efecto de intensidad reflejada en la interface sustrato-aire, ver Figura 2.10.

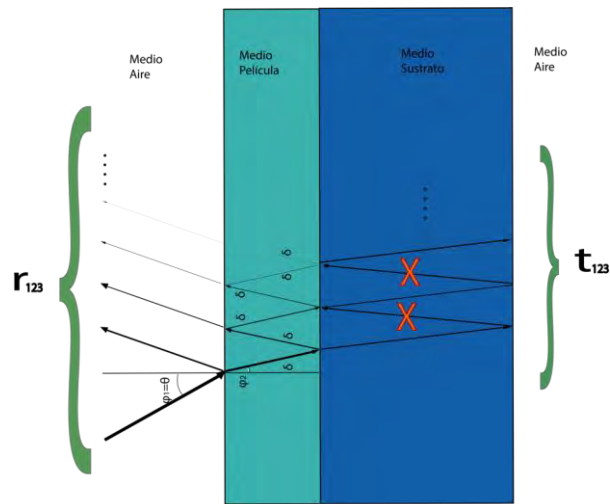


Figura 2.10: Representación de los coeficientes de Fresnel de reflectancia r_{123} y t_{123} .



Capítulo 3

MÉTODO ÓPTICO

Este capítulo se enfoca en el desarrollo y análisis del método de optimización propuesto en esta tesis y el método de la envolvente mejorada [13].

3.1 Método de la envolvente

Para una mejor comprensión del método de la envolvente mejorada revisaremos los elementos destacados que son de vital importancia en la aplicación de este método. Estos elementos destacados son la transmitancia total, transmitancia de interferencia libre y las envolventes.

3.1.1 Transmitancia total para una película delgada sobre sustrato transparente

El coeficiente de extinción de un sustrato transparente es cero, $k = 0$. Por ello la fase es real, ver ecuación (3.1).

$$\delta_s = \frac{2\pi s d_s}{\lambda} \quad (3.1)$$

donde s : índice de refracción del sustrato, d_s espesor del sustrato y λ : longitud de onda

Asumiendo el caso anterior, la absorbancia del sustrato transparente equivalente a $x_s = 1$ y además aproximando $\frac{k}{n} \ll 1$ (Película delgada ligeramente absorbente) y reemplazando en la ecuación (2.26), se obtiene la siguiente expresión, ver ecuación (3.2) [12]:

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos(\phi) + Dx^2} \quad (3.2)$$

$$A = 16sn^2$$

$$B = (n+1)^2(n+1)(n+s^2)$$

$$C = 2(n^2-1)(n-1)(n^2-s^2)$$

$$D = (n-1)^2(n-1)(n-s^2)$$

$$x = e^{-\alpha d}$$

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}$$

$$\phi = \frac{4\pi n d}{\lambda}$$

donde n : índice de refracción de la película delgada, s : índice de refracción del sustrato, ϕ : fase de la película, x : absorbancia, α : coeficiente de absorción de la película, d :

espesor de la película, k : coeficiente de extinción de la película delgada y λ : longitud de onda

3.1.2 Envoltente Máxima y Mínima

Los extremos de las franjas de interferencia o extremos de interferencia representan los picos máximos y mínimos de la transmitancia de una película delgada, ver Figura 3.1. Para determinar los extremos máximos, la fase ϕ toma los siguientes valores [9]:

$$\phi = \frac{4\pi nd}{\lambda} = j\pi, j = 0, 2, 4, 6, \dots \quad (3.3)$$

Para determinar los extremos mínimos, la fase ϕ toma los siguientes valores:

$$\phi = \frac{4\pi nd}{\lambda} = j\pi, j = 1, 3, 5, 7, \dots \quad (3.4)$$

Las envolventes son curvas continuas con respecto a λ . Los extremos de interferencia máxima están contenidos en la envolvente máxima y los extremos de interferencia mínima se encuentran en la envolvente mínima. Estas envolventes se ilustran en la Figura 3.1.

Planteamos dos ecuaciones para las envolventes. La ecuación de la envolvente máxima se obtiene considerando la fase ϕ , ver ecuación (3.5). De la condición de fase se modifica el término $\cos(\phi) = 1$, en la ecuación (3.2) y se obtiene la ecuación (3.5).

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (3.5)$$

La ecuación de la envolvente mínima se obtiene considerando la fase ϕ , ver ecuación (3.6). De la condición de fase se modifica el término $\cos(\phi) = -1$, en la ecuación (3.2) y se obtiene la ecuación (3.6).

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2} \quad (3.6)$$

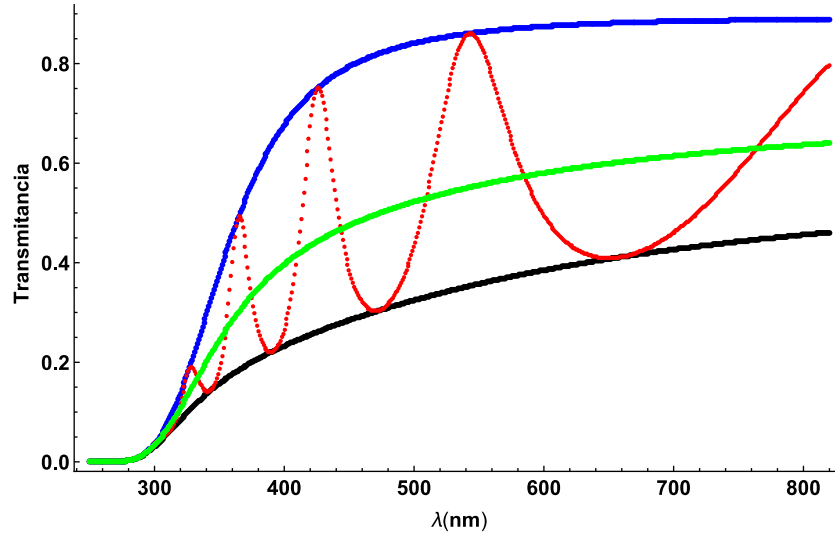


Figura 3.1: Simulación de las envolventes máxima, mínima, transmitancia total y transmitancia libre de interferencia de una película delgada. Línea azul representa la envolvente máxima, la línea negra representa la envolvente mínima, la línea roja representa la transmitancia total y la línea verde representa la transmitancia libre de interferencia de la película delgada.

3.1.3 Transmitancia libre de interferencia

Vamos a estudiar dos tipos de transmitancia libre de interferencia. Además analizar la ventaja y desventaja de emplear los dos tipos de transmitancia libre de interferencia para calcular la absorbancia x .

El primer caso, transmitancia libre de interferencia $T_{1\alpha}$ se calcula tomando el valor medio la ecuación (3.2) sobre la fase ϕ de 0 a 2π , ver [16]. $T_{1\alpha}$ se expresa en la siguiente ecuación (3.7).

$$T_{1\alpha} = \int T(\lambda, s, n, \alpha, d, d_s, \phi) d\phi = \frac{A^2 x^2}{((B + Cx + Dx^2)(B - Cx + Dx^2))^{\frac{1}{2}}} \quad (3.7)$$

De este resultado se logra otra equivalencia importante entre las envolventes y el primer caso de transmitancia libre de interferencia [12]. Ver ecuación (3.8)

$$T_{1\alpha} = \sqrt{T_M T_m} \quad (3.8)$$

Segundo caso, transmitancia libre de interferencia $T_{2\alpha}$ esta expresión equivale a la suma de las intensidades reflejadas y transmitida en la película delgada sin considerar la información de la fase o interferencia producido por las múltiples reflexiones en la película, ver Figura 2.10. $T_{2\alpha}$ se expresa de la siguiente ecuación (3.9) [13]:

$$T_{2\alpha} = \frac{(1 - R_1)(1 - R_2)(1 - R_3)}{1 - R_1 R_2 x^2 - R_2 R_3 - R_1 R_3 (1 - 2R_2) x^2} \quad (3.9)$$

$$R_1 = \left(\frac{1-n}{1+n} \right)^2$$

$$R_2 = \left(\frac{n-s}{n+s} \right)^2$$

$$R_3 = \left(\frac{s-1}{s+1} \right)^2$$

$$x = e^{-\alpha d}$$

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}$$

Donde k es el coeficiente de extinción de la película delgada, λ es la longitud de onda de la luz, n es el índice de refracción de la película delgada, s es el índice de refracción del sustrato, d es el espesor de la película.

Resaltar que los casos de transmitancia libre de interferencia libre no son equivalentes. El autor del método considera el uso de $T_{2\alpha}$ para calcular la absorbancia x . La elección de $T_{2\alpha}$ se da porque al realizar el calculo del error de la absorbancia Δx con respecto al error $\Delta T_{2\alpha}$ tiene una cantidad menor si comparamos la aplicación de $T_{1\alpha}$ para el calculo de la absorbancia x [10].

3.2 Método de la envolvente mejorada

Este método propone el uso de un modelo de dispersión para calcular las constantes ópticas de la película delgada [13]. En este caso se modela únicamente el índice de refracción usando las Series de Cauchy, ver ecuación (3.10).

$$n(\lambda) = a + \frac{b}{\lambda^2} + \frac{c}{\lambda^4} \quad (3.10)$$

Además, este método propone calcular la absorbancia x y que dependa únicamente de los parámetros ópticos de la película y la transmitancia total libre de interferencia $T_{2\alpha}$, ver ecuación (3.11).

Para obtener la expresión de la absorbancia $x(\lambda, n, d, T_{2\alpha})$, despejamos x de la ecuación (3.9), se obtiene la siguiente expresión (3.11).

$$x = x(\lambda, a, b, c, d, T_{2\alpha}) = \frac{P + (P^2 + 2QT_{2\alpha}(1 - R_2R_3))^{\frac{1}{2}}}{Q} \quad (3.11)$$

$$P = (R_1 - 1)(R_2 - 1)(R_3 - 1)$$

$$Q = 2T_{2\alpha}(R_1R_2 + R_1R_3 - 2R_1R_2R_3)$$

$$R_1 = \left(\frac{1-n}{1+n} \right)^2$$

$$R_2 = \left(\frac{n-s}{n+s} \right)^2$$

$$R_3 = \left(\frac{s-1}{s+1} \right)^2$$

Se observa que la absorbancia depende ahora de los parámetros $a, b, c, d, T_{2\alpha}$. Reemplazamos $x(\lambda, a, b, c, d, T_{2\alpha})$ en la ecuación (2.33). La nueva función de transmitancia total para una película delgada depende ahora exclusivamente de los parámetros $a, b, c, d, T_{2\alpha}$:

$$T = T(\lambda, a, b, c, d, T_{2\alpha}) \quad (3.12)$$

Entonces el objetivo es obtener los parámetros $a, b, c, d, T_{2\alpha}$. Para encontrar estos parámetros se realiza por medio de la ecuación (3.13) un ajuste no lineal respecto a la medida del espectro de transmitancia.

$$F = \sum_i^M (T^{Teorico}(a(\lambda_i), b(\lambda_i), c(n_i), \lambda_i, d(\lambda_i), T_{\alpha}(\lambda_i))) - T_i^{Medido}(\lambda_i)^2) \quad (3.13)$$

La forma no lineal de la ecuación de transmitancia complica la búsqueda de solución para realizar el ajuste, ver ecuación (3.13). Para solucionar este problema es necesario valores iniciales aproximados de los parámetros $a, b, c, d, T_{2\alpha}$.

Para obtener el valor aproximado de $T_{2\alpha}$ construimos las envolventes máxima y mínima en base a los puntos máximos y mínimo de interferencia. Realizamos el ajuste de la construcción de las envolventes y las ecuaciones (3.5, 3.6) [12].

Para obtener aproximadamente a, b, c, d se manipula manualmente los parámetros de la transmitancia $T(\lambda, a, b, c, d, T_{2\alpha})$. El objetivo es manipular valores a, b, c, d de tal forma que la transmitancia simulada ajuste lo mejor posible el espectro de medida de transmitancia. Los parámetros aproximados se utiliza como valores de inicio para ejecutar el ajuste medida.

Determinamos el índice de refracción utilizando los resultados anteriores a, b, c y reemplazamos en la ecuación (3.10). La absorbancia se obtiene reemplazando los valores encontrados $a, b, c, d, T_{2\alpha}$ en la ecuación (3.14).

$$x = x(\lambda, a, b, c, d, T_{2\alpha}) = \frac{(G - (G^2 - (n^2 - 1)^6(n^2 - s^4)^2))^{1/2}}{(n - 1)^3(n - s^2)} \quad (3.14)$$

$$G = \frac{128n^4s^2}{T_{2\alpha}^2} + n^2(n^2 - 1)^2(s^2 - 1)^2 + (n^2 - 1)^2(n^2 - s^2)^2$$

Para determinar el coeficiente de extinción reemplazamos los valores encontrados d y la absorbancia en la ecuación (3.14) en la ecuación (3.15).

$$k(\lambda) = -\frac{\lambda}{4\pi} \log(x(\lambda)d) \quad (3.15)$$

3.3 Método de optimización global

El objetivo es determinar de forma consistente las constantes ópticas para cada longitud de onda. Para lograr obtener $n(\lambda_i)$ y $k(\lambda_i)$ se considera un espesor conocido y dos medidas de transmitancia diferentes, ver ecuación (3.16) o también reflectancia y transmitancia, ver ecuación (3.17) [1,2,3,4,5,6].

$$\begin{aligned} T(n_i, k_i, \lambda_i, d, \theta)_{teorico} - T_{i\theta Experimental} &= 0 \\ T(n_i, k_i, \lambda_i, d, \alpha)_{teorico} - T_{i\alpha Experimental} &= 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} T(n_i, k_i, \lambda_i, d, \alpha)_{teorico} - T_{i\alpha Experimental} &= 0 \\ R(n_i, k_i, \lambda_i, d, \alpha)_{teorico} - R_{i\alpha Experimental} &= 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

donde $R_{i\alpha Experimental}$, $T_{i\theta Experimental}$ y $T_{i\alpha Experimental}$ corresponde a los espectros de reflectancia y transmitancia para diferentes ángulos de incidencia. El subíndice i corresponde la medida de transmitancia para cada longitud de onda λ_i . Al resolver numéricamente el sistema de dos ecuaciones, ver ecuaciones (3.16, 3.17), se obtiene soluciones ruidosas, divergente, discontinuas y valores no físicos [4,5,13]. Estas soluciones no garantiza constantes ópticas consistentes debido a alta sensibilidad del ruido de las mediciones con las soluciones n_i, k_i . Estos inconvenientes también perjudican a la búsqueda de soluciones al emplear métodos numéricos.

Para mitigar los problemas mencionados se aumenta un conjunto de medidas independientes para la misma muestra. Estos conjuntos de medidas de transmitancia se obtienen variando el ángulo de incidencia con una luz polarizada s y p. Estas medidas independientes se implementan en la función error, ver ecuación (3.19) y se minimiza esta función error hasta encontrar el mínimo global. Para un caso ideal, se encuentra un conjunto de soluciones que genere espectros teóricos iguales a los espectros experimentales de modo que la función error para cada longitud de onda es cero [9].

En la práctica, minimizar la función error σ_i^2 de modo se vuelva cero es una tarea imposible y se debe a que el valor de la función error σ_i^2 tiene un valor umbral $\sigma_i^2 > 0$ y este valor está determinado por la precisiones del conjunto de medidas de transmitancia $\Delta T^{S,P}(\lambda_i, \alpha_j)$.

3.3.1 Implementación del método de optimización

Para obtener el espesor de la película delgada se minimiza la función error global, ver ecuación (3.18).

$$\sigma_{total}^2(d) = \sum_i^N \sigma_{total}^2(n_i, k_i, \lambda_i, d) = \sum_i^N \sigma_i^2 \quad (3.18)$$

donde: N es la cantidad total de datos o de puntos de medida λ_i .

Para minimizar la función error global se debe minimizar $\sigma_i^2(d)$, ver ecuación (3.19). Minimizar $\sigma_i^2(d)$ es alcanzar un valor mínimo o umbral $\sigma_i^2(d) > 0$. Para obtener el valor umbral se necesita un valor de espesor d y un valor aproximado de las soluciones que se pretende recuperar n_i, k_i . Para utilizar el método de optimización se limita la regiones de búsqueda para los valores n_i, k_i y que estos regiones de búsqueda presenten un valor

con sentido físico de acuerdo a las constantes ópticas del material de caracterización. La razón de limitar la región de búsqueda es encontrar el mínimo global con menos caminos de búsqueda y también optimizar el tiempo computacional.

Después de limitar los valores n_i, k_i en regiones y utilizar el algoritmo para hacer converger al mínimo local se realiza una suma total de los puntos o longitud de onda de cada función error σ_i^2 y se calcula el valor de $\sigma_{total}^2(d)$, ver ecuación (3.18).

Nuevamente se minimiza la función error total para un espesor d_i :

$$d_i \rightarrow \text{minimizar } (\sigma_{total}^2(d_i))$$

Realizamos la misma operación, minimizar la función error $\sigma_{total}^2(d_i)$ para un conjunto de espesores $\{d_i, \dots, d_{i+n}\}$.

$$\begin{aligned} d_i &\rightarrow \text{minimizar } (\sigma_{total}^2(d_i)) \\ d_{i+1} &\rightarrow \text{minimizar } (\sigma_{total}^2(d_{i+1})) \\ &\vdots \\ d_{i+n} &\rightarrow \text{minimizar } (\sigma_{total}^2(d_{i+n})) \end{aligned}$$

Estos conjuntos de espesores estas limitados por un valor aproximado al espesor verdadero. Graficamos estos resultados y se observa un punto mínimo en la curva, ver Figura 3.2. El mínimo en la grafica garantiza que el espesor en ese punto sea óptimo.

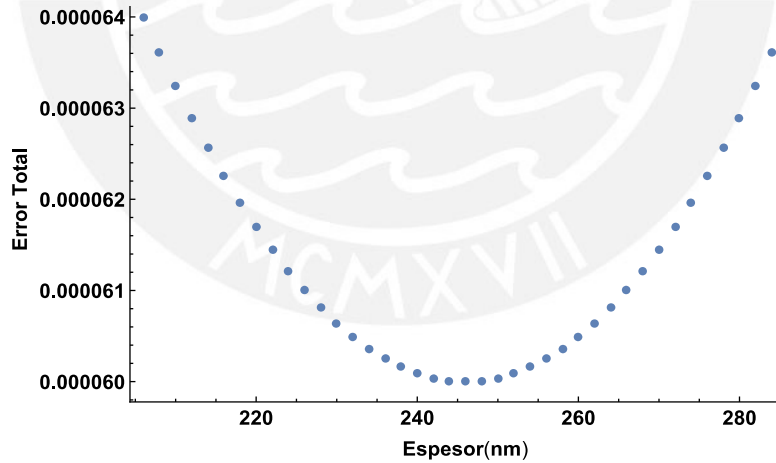


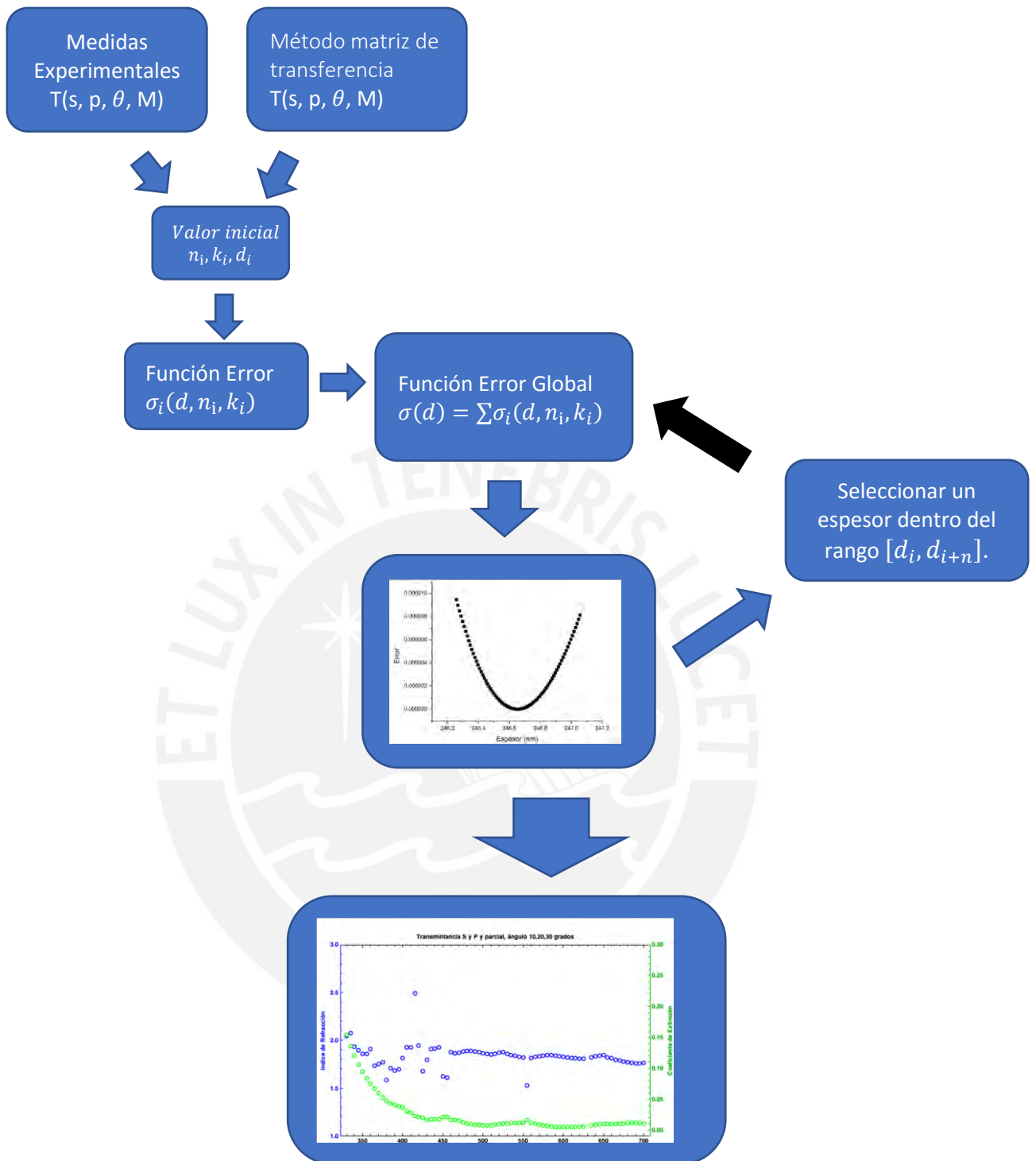
Figura 3.2: Cada punto corresponde el valor del resultado de minimizar la función error global para un espesor seleccionado en un rango definido $[d_i, d_{i+n}]$. Este rango definido se encuentra el valor aproximado del espesor de la película.

$$\begin{aligned} \sigma_i^2(d) &= \sigma_{total}^2(n_i, k_i, \lambda_i, d) \\ &= \sum_j^M [(T^S(n_i, k_i, \lambda_i, d, \theta_j)_{teorico} - T_{ij}^S_{Experimental})^2 \\ &\quad + (T^P(n_i, k_i, \lambda_i, d, \theta_j)_{teorico} - T_{ij}^P_{Experimental})^2] \end{aligned} \quad (3.19)$$

Aquí, $T^{S,P}(n_i, k_i, \lambda_i, d, \theta_j)$ es el espectro de transmitancia teórico , $T_{ij}^{S,P}{}_{Experimental}$ espectro de transmitancia experimental, θ_j es el ángulo de incidencia para obtener medidas independientes y M cantidad total de ángulo de incidencia. El subíndice j recorre el conjunto de medidas independientes que depende del ángulo de incidencia y el subíndice i recorre el conjunto de mediciones independientes que depende de la longitud de onda λ_i .

En el siguiente esquema se presenta la secuencia del método de optimización para obtener las constantes ópticas n_i, k_i, d .





Capítulo 4

Detalle experimental

En este capítulo se presenta los espectros de transmitancia experimental que están vinculados con el ángulo de incidencia y la luz polarizada s y p. Se construye un portamuestra giratorio para generar espectro de transmitancia experimental que depende del ángulo de incidencia [14]. El espectrofotómetro de transmitancia (PerkinElmer/ Lambda 950) cuenta con un portamuestra de ángulo de incidencia normal es decir solo realiza medida de transmitancia para un solo ángulo de incidencia normal y es reemplazado por el portamuestra giratorio. Además, se instala dos polarizadores donde el primer polarizador interactúa con la luz de la fuente e interacciona directamente con la película delgada y el segundo polarizador se localiza cerca de la fuente de luz de referencia. La construcción de dos portamuestras giratorio y la instalación de dos polarizadores ayudarán aumentar el número de medidas independientes. Estas medidas independientes dependerán del ángulo de incidencia en la película delgada sobre un sustrato transparente y además del estado de polarización de la luz.

4.1 Portamuestra giratorio

Se obtiene un conjunto de medida de transmitancia que dependa de una variable adicional, es decir del ángulo de incidencia de luz en la película delgada. Para este propósito se construye un portamuestra giratorio con el fin de relacionar el ángulo de rotación del portamuestra y el ángulo de incidencia de luz en la película delgada instalada en el segunda portamuestra, ver Figura 4.1. En este caso contamos con dos portamuestra idénticas. El estado polarizado de la luz se deja pasar por el spot. El área del spot de ambas portamuestras es de igual tamaño. El área del spot de cada portamuestra debe ser exactamente igual para que la luminancia o la densidad superficial de intensidad luminosa sean igual y constante.

Para obtener buenos resultados en la medición de transmitancia es importante considerar el área del spot por consiguiente el diámetro del spot. El valor del diámetro del spot dependerá de la máxima rotación posible en el portamuestra y a su vez mantener la localización de la intensidad máxima del estado polarizado de la luz en el área del spot. El valor del diámetro es de 4 mm para obtener una rotación máxima de 0 hasta 50 grados a su vez mantener la intensidad máxima localizada en el área del spot. Si el valor del diámetro es menor a 4mm se obtiene mayor intensidad de localización en el área del spot pero menos rango de rotación. Si el valor del diámetro es mayor a 4 mm entonces se perderá intensidad localizada en el spot, pero se obtiene mayor rango de rotación.

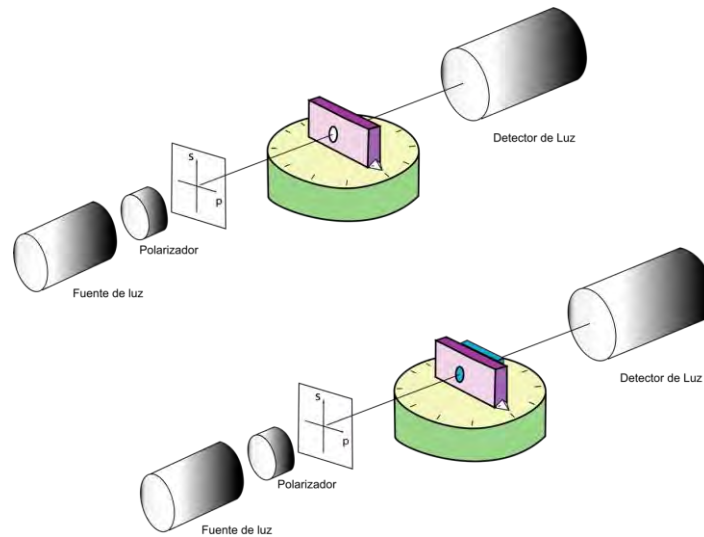


Figura 4.1: Sistema óptico conformado por una fuente de luz, polarizador, detector de luz y dos portamuestra giratorio. Cada portamuestra tiene un spot donde se deja pasar luz en estado polarizado. El área del spot es equivalente para cada portamuestra. El diámetro del spot es de 4 mm.

4.2 Calibración del Polarizador

Para comprobar experimentalmente si la luz polarizada s y p esta direccionada correctamente en la película delgada, se procede en dos pasos. El primer paso es obtener la misma dirección de polarización en la luz de referencia y luz que interactúa con la película delgada. Para obtener la misma dirección de polarización de luz se debe calibrar los polarizadores en la misma dirección. Para calibrar los polarizadores se deja pasar luz a través de ellos. La luz de la fuente interacciona con el primer polarizador y queda linealmente polarizado, al pasar por el segundo polarizador la intensidad de luz polarizado disminuye según varía el ángulo de rotación del filtro, este proceso es conocido como la ley de Malus, ver ecuación (4.1). Para obtener la misma dirección de transmisión para ambos polarizadores se debe variar el ángulo de rotación del filtro del segundo polarizador y alcanzar la máxima intensidad es decir la máxima transmitancia. Al obtener la transmitancia máxima variando el ángulo de rotación del filtro se obtiene la dirección de transmisión sea igual para ambos polarizadores.

$$I = I_0 \cos^2(\phi) \quad (4.1)$$

Después de calibra los polarizadores en la misma dirección de transmisión. El segundo paso es encontrar la dirección s o p con respecto a la película delgada. Para buscar las direcciones s y p , analizamos los espectros de transmitancia, ver Figura 1.1, se observa que la transmitancia para luz polarizada s en una película delgada es mínima y la transmitancia con luz polarizada p en una película delgada es máxima. Para comprobar experimentalmente la dirección de luz polarización s y p con respecto a la película delgada, incidimos luz con una longitud de onda $\lambda_0 = 630 \text{ nm}$ y ángulo de incidencia $\phi_0 = 20$ grados a la película delgada de óxido de indio dopado con estaño.

Los parámetros ϕ_0 y λ_0 se mantienen iguales al realizar medidas de transmitancia para cada variación angular de rotación del eje de polarización. La variación angular de rotación es 10 grados para un rango de 0 a 90 grados y los ejes de polarización se mantienen siempre sincronizados al variar el ángulo de rotación cuando se realiza las medidas de transmitancia. Se obtiene las medidas correspondientes de transmitancia y la rotación del polarizador ϕ , ver Figura 4.2. Los puntos conformados dentro del valor de máxima y mínima de transmitancia representa la combinación lineal de ambos estados polarizados s y p , ver figura 4.2. Se observa una transmitancia mínima para un ángulo de rotación de la luz $\phi = 12.5 \text{ grados}$. Significa que una vez calibrado los filtros de ambos polarizadores y se rota los ejes de polarización a un ángulo de 12.5 grados se está direccionando la polarización s en la película delgada.

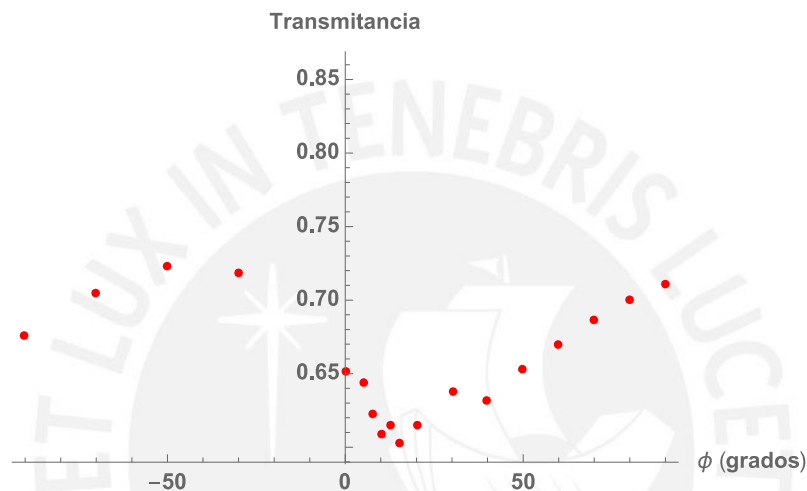


Figura 4.2: Medida de transmitancia variando el ángulo de rotación del polarizador ϕ . Las medidas de transmitancia se obtienen para una sola longitud de onda de 630 nm. Las medidas de transmitancia corresponde a la película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio sobre sustrato transparente.

Capítulo 5

Resultados y discusión

En la primera parte de este capítulo se simula el espectro de transmitancia teórica con luz polarizada s y p y variando en ángulo de incidencia. Estos resultados son de importancia para lograr adecuados espectros de transmitancia experimental. La segunda parte del capítulo se analiza mediante un mapeo la disminución de mínimos locales con respecto a la función error al aumentar el número de medidas independientes. Estos resultados tienen como objetivo disminuir los mínimos locales al aumentar medidas independientes apropiados y así lograr localizar el mínimo global, además de conectar este resultado con la obtención de n y k . Por último, se comparan resultados del método de optimización y el método de la envolvente mejorada.

5.1 Simulación numérica

Para realizar medidas de transmitancia para ángulos de incidencia oblicua será adecuado analizar cómo se desenvuelve en la simulación numérica, en este capítulo vamos a simular el espectro de transmitancia de la película delgada (Óxido de indio dopado con estaño y terbio) sobre sustrato transparente. Para lograr este proceso vamos a usar el espesor, índice de refracción y el coeficiente de absorción que se obtiene del método de la envolvente mejorada para la película delgada de óxido de indio dopado con estaño.

En la Figura 5.1, se observa que al aumentar el ángulo de incidencia hay un ascenso en la transmitancia para el caso de luz polarizada p y un descenso de transmitancia para luz polarizada s . Este aumento y descenso se debe a que el coeficiente de reflexión de Fresnel para la luz polarizada p (r_p), disminuye hasta cierto ángulo característico conocido como ángulo de Brewster, cabe resaltar entonces que cuando disminuye el coeficiente de reflexión aumenta el coeficiente de transmisión ver ecuación (5.1). Para el caso de coeficiente de reflexión para luz polarizada s solo aumenta con respecto al ángulo de incidencia y a su vez disminuye el coeficiente de transmisión, ver ecuación (5.1).

$$r_{s,p} + t_{s,p} = 1 \quad (5.1)$$

En la Figura 5.1, se observa que los puntos máximos y mínimos del espectro de transmitancia se trasladan a la izquierda es decir ocurre un cambio de la longitud de onda con respecto a la ubicación del máximo y mínimo en el espectro simulado. Esto se debe principalmente del ángulo de incidencia. Observamos en la ecuación (5.2), para calcular los puntos máximos y mínimos la diferencia de fase se mantiene constante 2δ , entonces la única razón por la cual disminuye la longitud de onda es porque aumenta el ángulo de incidencia porque el espesor y el índice de refracción complejo se mantienen constantes para cada longitud de onda.

$$2\delta = \frac{4\pi d}{\lambda} \sqrt{N^2 - \sin^2(\phi)} = j\pi; \quad j = 0,1,2,.. \quad (5.2)$$

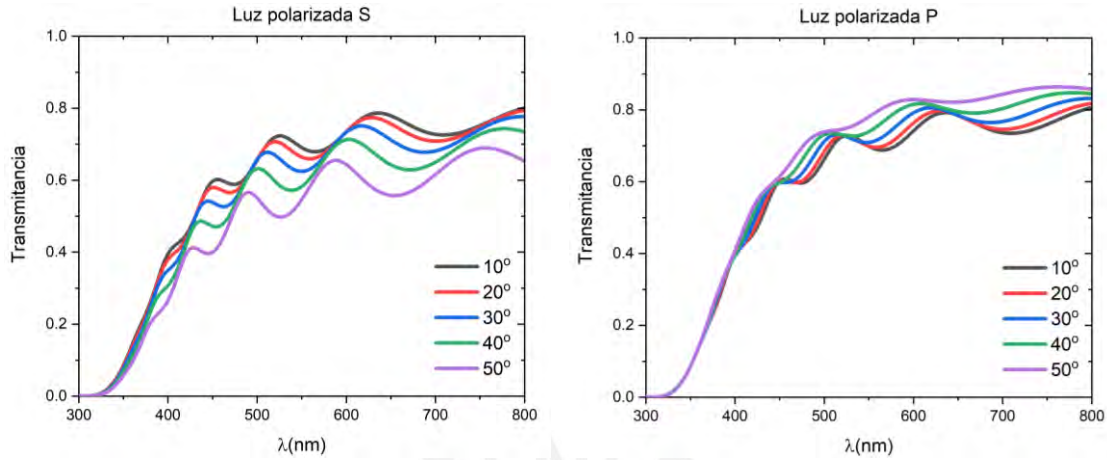


Figura a

Figura b

Figura 5.1: Simulación de espectros de transmitancia de una película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio sobre sustrato transparente con luz polarizada *s* y *p*, para ángulo de incidencia 10, 20, 30, 40 grados

En la Figura 5.2, se observa una pequeña diferencia de separación en los espectros de transmitancia simulado en la región de absorción media. Los espectros de transmitancia con pequeña variación de ángulo de incidencia no serán de gran aportación para el método de optimización porque no estamos generando medidas independientes.

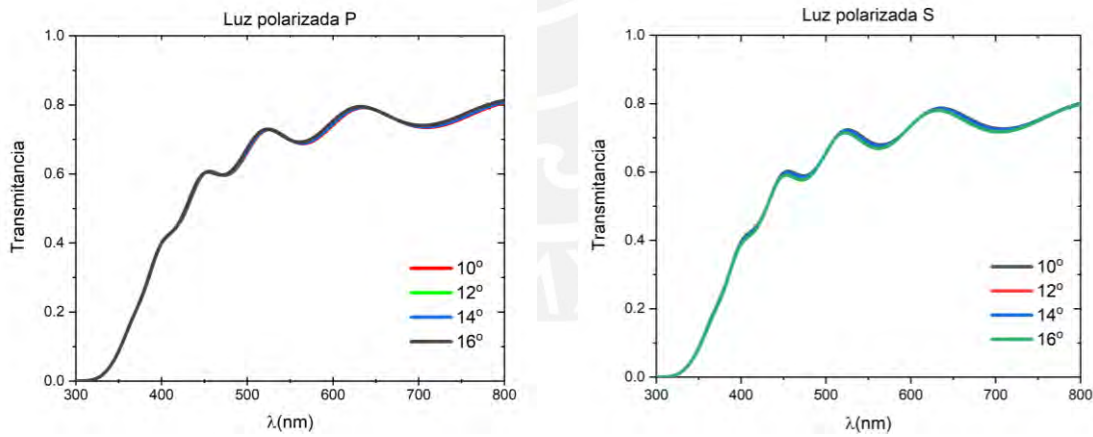


Figura a

Figura b

Figura 5.2: Simulación de espectros de transmitancia de una película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio sobre sustrato transparente con luz polarizada *s* y *p*, para ángulo de incidencia 10,12,14,16 grados.

En la Figura 5.1, se observa una notable separación en los espectros de transmitancia simulada en la región media absorbente. Estos espectros de transmitancia para ángulos de incidencia 10, 20, 30, 40 grados son ideales para el método de optimización porque son medidas independientes en la región de absorción media.

5.2 Resultados

En esta parte de la tesis se probará el método de optimización para obtener las constantes ópticas de una película y se verificará con los resultados del método de la envolvente mejorada [13].

La muestra que se caracteriza una película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio sobre sustrato transparente. Esta película delgada fue preparada usando la técnica de pulverización catódica de radio de frecuencia. La película fue depositada en un sustrato transparente (CaF_2) de espesor 1.0 mm. Los espectros de transmitancia se obtuvieron con un espectrofotómetro (Perkin Elmer), modelo Lambda 950- US/VIS/NIR de doble haz. El primer haz de luz incide en portamuestra giratorio de referencia y el otro haz incide en la película delgada y a su vez esta película delgada está instalada en el otro portamuestra giratorio idéntico al otro portamuestra giratorio que se encuentra como referencia, ver Figura 4.1.

Los espectros de transmitancia se obtienen usando los polarizadores y la portamuestra giratorio. Instalamos los polarizadores calibrados en la dirección de polarización *s* y *p* con respecto a la película delgada, ambos polarizadores están en su correspondiente lugar, ver figura 4.1. Las medidas se registran polarizando la luz en dirección *s* y *p* e incidiendo con un ángulo de 10, 20, 30, 40 grados en la película delgada. Estas medidas se realizan para un rango de luz de 300 a 700 nm.

En la Figura 5.3, se muestran espectros de transmitancia experimental con ángulo de incidencia 10, 20, 30, 40 grados con luz polarizada *s* y *p*. Los espectros de transmitancia responden de forma similar a la simulación, ver figura 5.1.

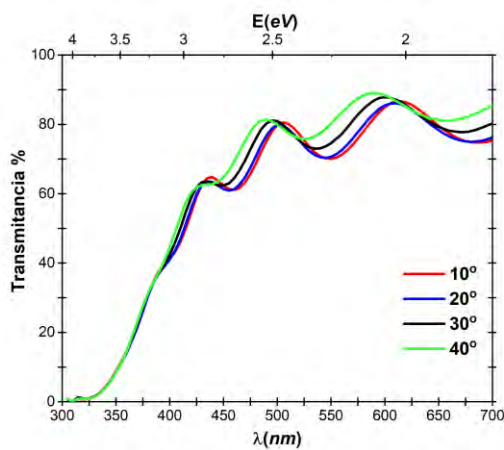


Figura a

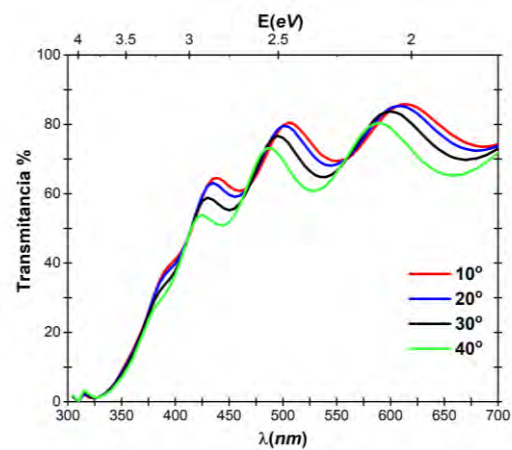


Figura b

Figura 5.3: Figura a) Espectro de transmitancia experimental con luz polarizada *p*, con ángulos de incidencia 10, 20, 30, 40 grados. Figura b) Espectro de transmitancia experimental con luz polarizada *s*, con ángulos de incidencia 10, 20, 30, 40 grados.

En la Figura 5.4, se determina el espesor óptimo de la película delgada aplicando la función error global total. Para obtener este resultado utilizamos espectros de transmitancia con ángulo de incidencia 10,20,30,40 grados con luz polarizada *s* y *p*. En

total usamos ocho espectros de transmitancia. Además, se limita la regiones de búsqueda para los valores n_i, k_i , estos valores se aproximan utilizando datos de constantes ópticas de otras fuentes [15].

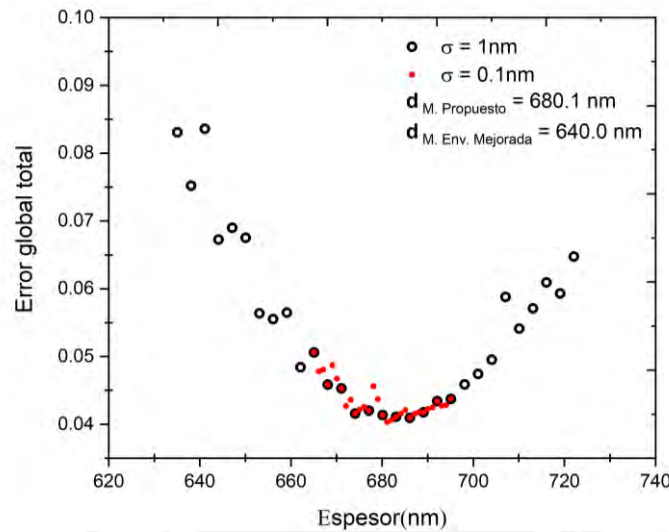


Figura 5.4: Encontramos el error global total con respecto a cada espesor con diferencias de separación de 1 nm para los puntos negros y 0.1 nm para los puntos rojos.

El método de optimización realiza una búsqueda del mínimo global. En esta búsqueda cabe la posibilidad de no obtener el mínimo global sino en un mínimo local, ver Figura 5.5. Los mínimos locales surgen de la precisión de la medida experimental y de la función no lineal, ver ecuación (3.18). Estos mínimos locales generan soluciones inestables, sin sentido físico o divergentes. El objetivo es disminuir los mínimos locales para esto necesitamos averiguar el efecto de mínimos locales con el aumento de medidas de independientes. Para este objetivo se realiza el mapeo del mínimo global y local. En el Figura 5.5, se considera el eje z como el error total. Se usa como rango principal el índice de refracción (eje x) y el coeficiente de extinción (eje y).

En la Figura 5.5a, se observa una región donde no se aprecia el mínimo global, esto causa problemas de búsqueda al implementar el método de optimización. La dificultad de búsqueda se da porque existen muchos mínimos locales en esta región (Azul oscuro). Estos mínimos locales causan soluciones discontinuas y sin ningún sentido físico, ver Figura 5.6a. En las Figuras 5.5b y 5.5c, se observa la región de localización del mínimo global al aumentar las medidas independientes. Si se aumenta las medidas independientes, entonces la región de localización disminuye y esto favorece a la búsqueda de soluciones consistentes. Finalmente, en la figura 5.5d, se observa la región de localización del mínimo global. Para localizar el mínimo global se debe implementar como mínimo ocho medidas de redundancia en la función error para luego emplear el método de optimización.

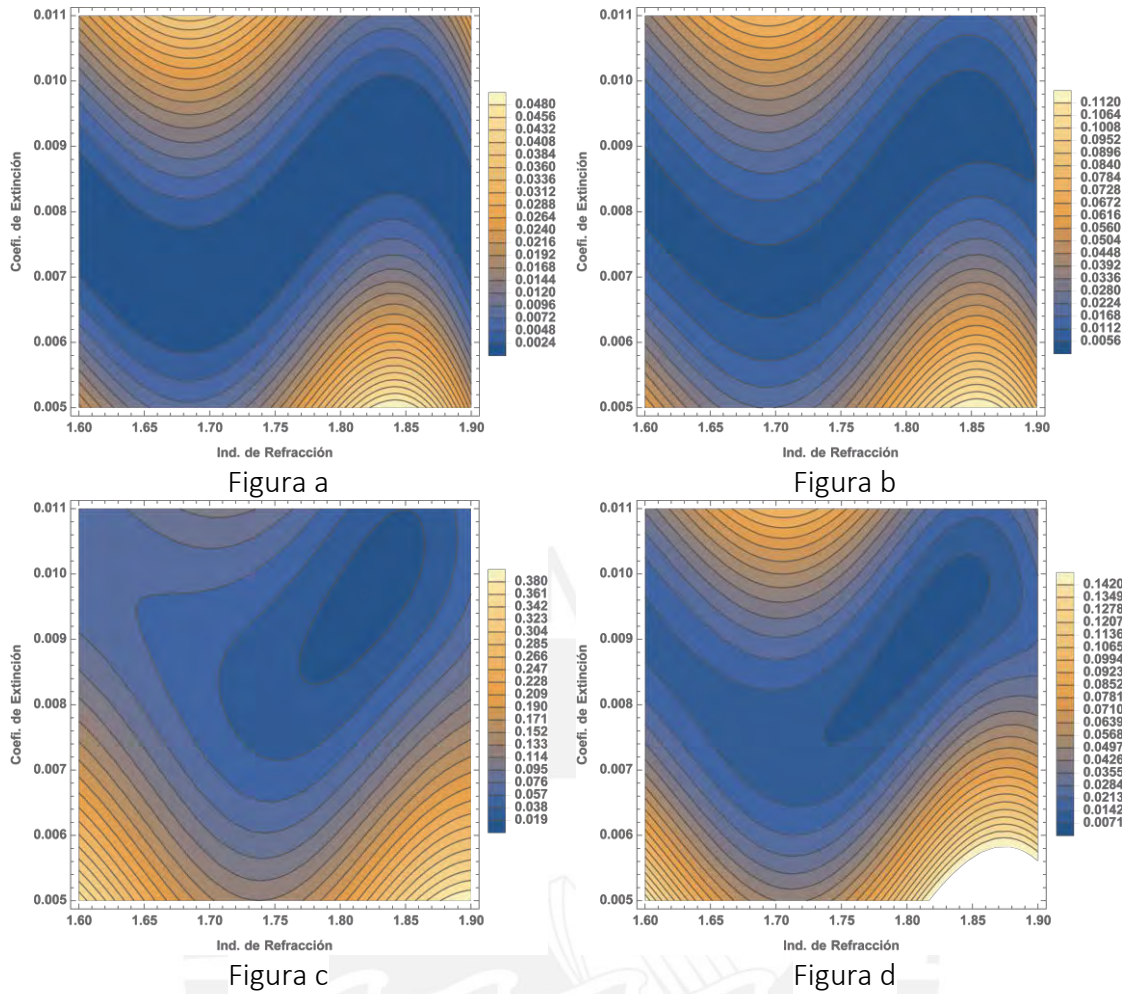


Figura 5.5: Mapeo del mínimo local y global usando como rango principal el índice de refracción (eje x) y el coeficiente de extinción (eje y). Figura a) se implementa dos espectros de transmitancia experimental (ángulo de incidencia 10 grados- luz polarizada s y p). Figura b) se implementa cuatro espectros de transmitancia experimental (ángulo de incidencia 10, 20 grados- luz polarizada s y p). Figura c) se implementa seis espectros de transmitancia experimental (ángulo de incidencia 10, 20, 30 grados- luz polarizada s y p). Figura d) se implementa ocho espectros de transmitancia experimental (ángulo de incidencia 10, 20, 30, 40 grados- luz polarizada s y p).

En la Figura 5.6, se observa la evolución de la obtención de las constantes ópticas (índice de refracción y coeficiente de extinción) con respecto a la implementación de medidas independientes a la función error global para luego emplear el método de la optimización.

Se nota una mejor continuidad en la curva solución del índice de refracción y coeficiente de extinción con respecto al aumento de las medidas independientes.

El aumento de estas medidas independientes logra disminuir la región de localización como resultado se obtiene soluciones consistentes, ver Figura (5.6d).

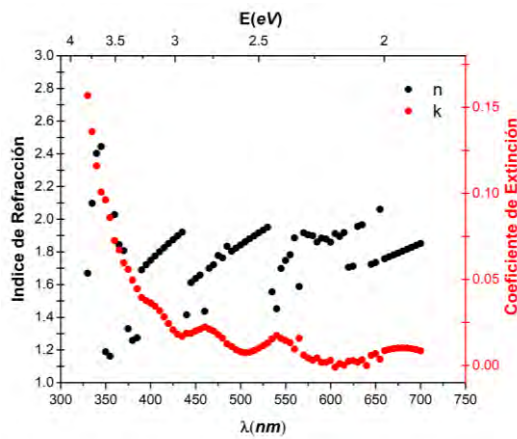


Figura a

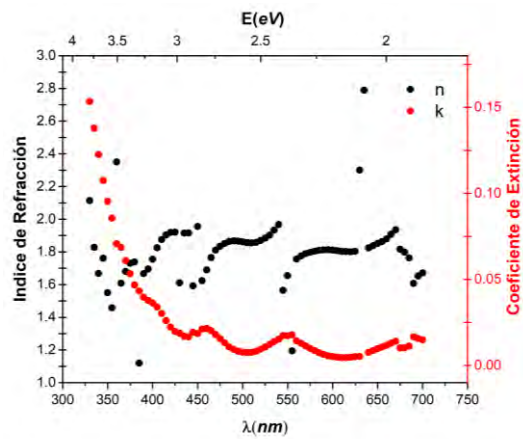


Figura b

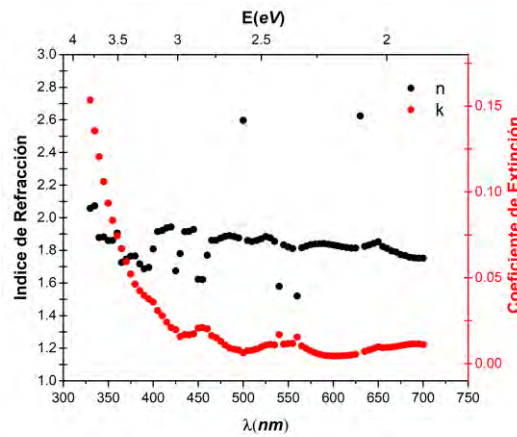


Figura c

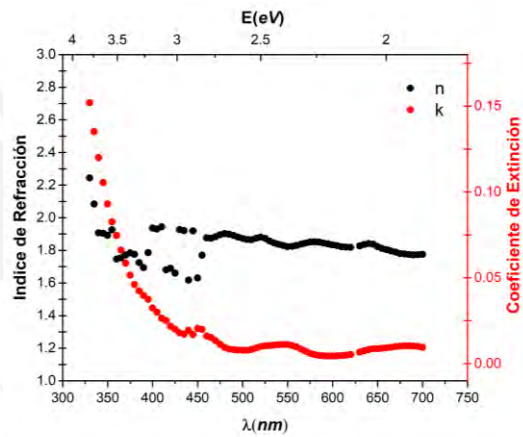


Figura d

Figura 5.6: Obtención del Índice de refracción y coeficiente de extinción usando el método de optimización para una cantidad de espectros de transmitancia experimental. En la figura a) se implementa dos espectros de transmitancia experimental (ángulo de incidencia 10 grados- luz polarizada s y p). Figura b) se implementa cuatro espectros de transmitancia experimental (ángulo de incidencia 10, 20 grados- luz polarizada s y p). Figura c) se implementa seis espectros de transmitancia experimental (ángulo de incidencia 10, 20, 30 grados- luz polarizada s y p). Figura d) se implementa ocho espectros de transmitancia experimental (ángulo de incidencia 10, 20, 30, 40 grados- luz polarizada s y p).

En la Figura 5.7, se comparan resultados del método de optimización y el método de la envolvente mejorada. Se valida los resultados tanto para el índice de refracción y coeficiente de extinción para el rango de absorbancia media. En la figura 5.7b, se observa soluciones ruidosas en la región de absorbancia fuerte. Estas soluciones discontinuas se deben a que el índice de refracción es sensible a la precisión de las medidas en esta zona. Además, se obtiene estos resultados ruidosos porque en el espectro de transmitancia en la zona absorbente es casi igual para todos los ángulos de incidencia con luz polarizada s y p . Es decir en la zona absorbente no se nota una gran diferencia entre los espectros de transmitancia experimental entonces no logra generar medidas de transmitancia independientes. Los espectros de transmitancia experimental en la región de absorción fuerte no genera medidas independientes por esta razón se obtiene una gran cantidad

de mínimos locales, ver Figura 5.5a , por lo tanto se obtiene soluciones discontinuas, ver Figura 5.6a. Estas discontinuidades tambien se observan al determinar las constantes opticas usando dos espectros de transmitancia y dos espectros de reflectancia [16]. En la figura 5.7a, se observa continuidad en la zona absorbente, esto radica a que el coeficiente de extinción influye más en las medidas de transmitancia.

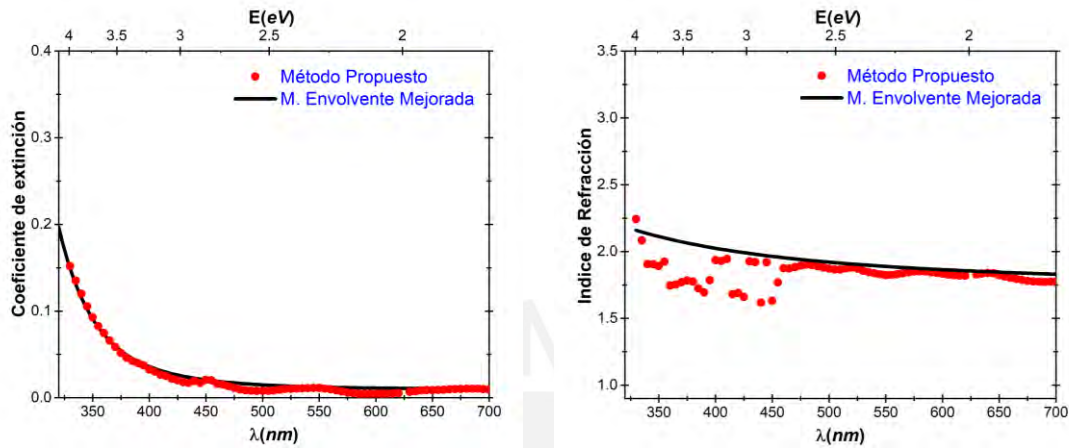


Figura a

Figura b

Figura 5.7: Figura a) se obtiene la coeficiente de extinción para cada punto es decir para cada longitud de onda. La separación de cada punto es de 4nm. Figura b) se obtiene la índice de refracción para cada punto es decir para cada longitud de onda, la separación de cada punto es de 4nm.

En la Figura 5.8, se muestra el espectro de transmitancia del de óxido de indio dopado con estaño y terbio depositado en un sustrato de CaF2 y el espectro de transmitancia calculado a partir de las constantes obtenidas usando el método de optimización. Se logra con éxito el ajuste del espectro de transmitancia experimental y teórico, ver Figura 5.8.

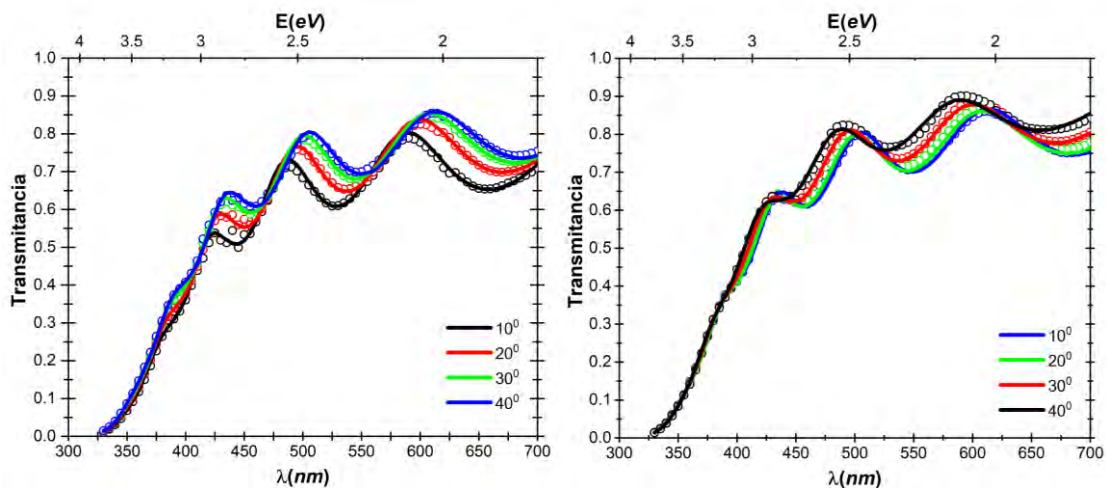


Figura a

Figura b

Figura 5.8: Línea continua corresponde al espectro de transmitancia experimental con luz polarizada s y p y los conjuntos de círculos corresponden al espectro de transmitancia recuperada.

Conclusiones

En este trabajo se ha presentado el método de optimización para obtener constantes ópticas de forma consistente de una película delgada de óxido de indio dopado con estaño y terbio.

Se demostró que aumentar las medidas independientes mejoran notablemente los resultados de las constantes ópticas de la película delgada sobre sustrato transparente, ver Figura 5.10. Para generar medidas independientes se construyó un portamuestra giratorio para obtener espectros de transmitancia que dependan del ángulo de incidencia. Además, se instalaron polarizadores para generar espectros de transmitancia que dependan de la luz polarizada s y p .

Se lograron obtener medidas independientes confiables simulando los espectros de transmitancia. En este caso, simulamos los espectros de transmitancia variando el ángulo de incidencia para una luz polarizada s y p . Además, se simuló el comportamiento del espectro de transmitancia para ángulos de incidencia de 10, 12, 14, 16 grados y se obtuvieron espectros de transmitancia idénticos. Es decir, estos espectros de transmitancia no son apropiados para el método de optimización porque generan soluciones no físicas, discontinuas, etc. Por otro lado, simulamos los espectros de transmitancia con ángulos de incidencia 10, 20, 30, 40 grados y se lograron obtener medidas independientes.

En la Figura 5.6, se observaron mejores resultados con respecto a la continuidad en $k(\lambda_i)$ comparado con $n(\lambda_i)$ para un conjunto mínimo de medidas independientes. Además, el aumento de las medidas independientes mejoran la continuidad en $k(\lambda_i)$ con respecto a $n(\lambda_i)$. Estas diferencias de continuidad se debe principalmente porque el valor de $n(\lambda_i)$ es sensible al ruido de la medida experimental, entonces genera muchos mínimos locales y por lo tanto soluciones discontinuas. En cambio, $k(\lambda_i)$ se observa una notable continuidad porque el coeficiente de extinción influye más en las medidas de transmitancia sobre todo en la region de absorción alta por consiguiente genera una disminución notable en los minimos locales, ver Figura 5.5.

En la Figura 5.7, se observa discontinuidad en la región de absorción alta pero en la región de absorcion media sucede lo contrario. La discontinuidad en la región de absorción alta se debe al ruido de la medida experimental. Además, los espectros de transmitancia en la región de absorción alta son aproximadamente equivalentes. Es decir, no cumplen con el requisito de ser medidas independientes. Una solución es obtener espectro de reflectancia experimental.

En la Figura 5.5 , el aumento de las medidas independientes generan la localización del mínimo global. Practicamente se localiza el mínimo global porque se logra promediar todas las soluciones de cada medida independiente. Es decir, a mayor cantidad de

medidas independiente mayor será el número de soluciones y conjuntamente promediar estas soluciones se obtiene una mejor precisión del mismo.

Se obtuvo el espesor de la película delgada minimizando la función error global utilizando ocho espectros de transmitancia experimental, ver Figura 5.4. Se logró el ajuste entre el espectro de transmitancia teórica y experimental, ver figura 5.8. El método de optimización se puede implementar para obtener otra constante óptica usando otro tipo de espectro [17].



Bibliografía

- [1] D. Pekker, L. Pekker, "A method for determining thickness and optical constants of absorbing thin films", *Thin Solid Films*, 425, 203–209, (2003).
- [2] G. Yin, C. Merschjann, "The effect of surface roughness on the determination of optical constants of CuInSe₂ and CuGaSe₂ thin films", *J. App. Phys.* 113, 213510 (2013).
- [3] J. Guerra, A. Tejada, Optical characterization and bandgap engineering of flat and wrinkle-textured FA_{0.83}Cs_{0.17}Pb(I_{1-x}Br_x)₃ perovskite thin films ", *.App. Phys.* 123, 175302, (2018).
- [4] O. Stenzel, V. Hopfe, "Determination of optical parameters for amorphous thin film materials on semitransparent substrates from transmittance and reflectance measurements", *J. Phys. D: Appl. Phys.* 24, p. 2088-2094, (1991).
- [5] R. Phillips, "A numerical method for determining the complex refractive index from reflectance and transmittance of supported thin films", *J. Phys. D: Appl. Phys.* 16, p. 489, (1983).
- [6] A. B. Djurišić, T. Fritz, "Improved method for determination of optical constants of organic thin films from reflection and transmission measurements," *Appl. Opt.* 39, p.1174–1182, (2000).
- [7] C. C. Katsidis, D. I. Siapkas, "General transfer-matrix method for optical multilayer systems with coherent, partially coherent, and incoherent interference", *Appl. Opt.* 41, 3978–3987 (2002).
- [8] H Fujiwara. *Spectroscopic Ellipsometry, Principles and Applications*. Jhon Wiley & Sons. 2007.
- [9] O. Stenzel. *The Physics of thin Film Optical Spectra*. Springer, Second Edition. 2016.
- [10] K.Y. Tucto, "Determinación de las constantes ópticas y el espesor de las películas delgadas semiconductoras depositadas por pulverización catódica de radio frecuencia sobre sustratos ligeramente absorbentes en la region visible". (Tesis de maestría PUCP, Lima-Perú, 2012).
- [11] B. Hristov, P. Gushterova, "Analytical solution of the inverse optical problem for very thin films", *J. Optoelectron. Adv. M.*, Vol. 9, No. 1, p. 217 – 220, (2007).
- [12] R. Swanepoel, "Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon," *J. Phys. E* 16, p. 1214–1222, (1983).
- [13] J. A. Guerra, "Determination of the optical bandgap of amorphous (SiC)_{1-x}(AlN)_x films produced by radio frequency dual magnetron sputtering" (Master Thesis PUCP, Lima-Perú, 2010).
- [14] P.A. van Nijnatten, "Optical analysis of coatings by variable angle spectrophotometry", *Thin Solid Films* 516, 4553–4557, (2008).
- [15] C. Torres, "Propiedades ópticas y eléctricas de películas delgadas de óxido de indio dopadas con estaño y terbio". (Tesis de maestría PUCP, Lima-Perú, 2018).
- [16] P. Kutavichus, V. Filippov, "Determination of optical parameters and thickness of weakly absorbing thin films from reflectance and transmittance spectra", *Appl. Opt.* Vol. 45, p.4547-4553, (2006).

[17] J. A. Guerra, A. Tejada, "Determination of the complex refractive index and optical bandgap of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ thin films" J. App. Phys. 41(16), 121, 173104 (2017).

